

## C<sub>4</sub>F<sub>6</sub>-Ar 혼합기체에서의 Plasma Discharge Simulation을 위한 C<sub>4</sub>F<sub>6</sub> 초기단면적 결정

이경엽\*, 전병훈\*  
동국대학교\*

### Determination of the initial cross-sections for the C<sub>4</sub>F<sub>6</sub> molecule from the electron drift velocity

Kyung-Yeob Lee\*, Byung-Hoon Jeon\*  
Dongguk University\*

**Abstract** – For quantitative understanding of gas discharge phenomena, we should know electron collision cross section. Processing plasma etching of semiconductor, and research are being used in the etching source C<sub>4</sub>F<sub>6</sub> gas may be used by itself and mixed with other gases are also used. However, the molecular gas C<sub>4</sub>F<sub>6</sub> study on the characteristics of the electron transport and the cross-sectional area of the decision is still lacking. Therefore, we understand the electron transport characteristics and analysed the electron transport coefficients. And to understand and interpret physical properties of the ionization coefficient  $\alpha/N$ , and the attachment coefficient  $n/N$  in C<sub>4</sub>F<sub>6</sub> gas.

### 1. 서 론

현재 반도체 식각 공정에서 Si 및 SiO<sub>2</sub> 물질을 식각하는데 있어서 대표적으로 염소 및 브롬, 불소를 기반으로 하는 가스를 많이 사용하고 있다. 소자의 크기가 감소함에 따라 식각 특성이 좋은 즉, 이방성 식각이 필수적으로 요구되어 졌으며 상대적으로 식각 특성이 좋은 CF계열의 가스가 많이 사용되고 있다. CF계열의 가스 중(CF<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>F<sub>6</sub>, C<sub>3</sub>F<sub>6</sub>, C<sub>4</sub>F<sub>6</sub>, C<sub>4</sub>F<sub>8</sub>, C<sub>5</sub>F<sub>8</sub>등) C/F의 비가 높은 C<sub>4</sub>F<sub>6</sub>가스의 식각 특성이 가장 좋고, 지구 온난화 지수(global Warming Potential)가 가장 낮다는 장점으로 식각 공정용 가스로 각광받고 있다. 이는 Si식각 시 C/F의 비율이 높은 물질일수록 Si벽면에 C-F polymer가 형성되어 벽면의 자발적 식각(spontaneous etching)을 막음으로써 이방성 식각을 얻게 하고, SiO<sub>2</sub>식각 시 SiO<sub>2</sub>/Si의 식각선택도를 커지게 하는 효과를 가지고 온다.

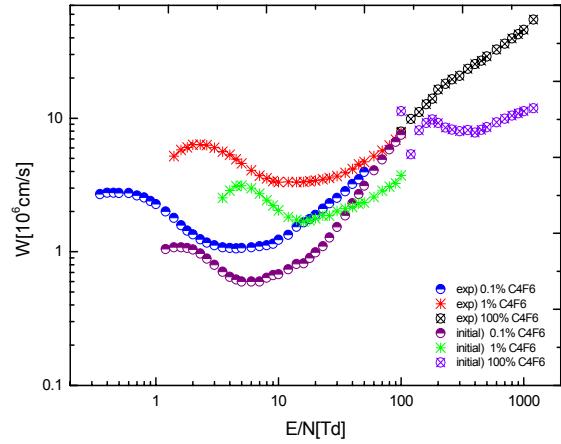
이러한 식각 특성은 실험적으로만 증명되어 왔고, 식각특성에 관여하는 플라즈마 파라미터 (plasma density, radical density, static potential, ion energy etc.)와 그 값을 결정짓는 전자충돌단면적에 대한 연구가 미비한 실정이다. 따라서 이번 연구에서 전자군 방법에 의한 C<sub>4</sub>F<sub>6</sub>-Ar 혼합기체에서의 이동속도(W)에 따른 C<sub>4</sub>F<sub>6</sub>의 초기충돌단면적 (collision cross section)을 결정하고 전자수송특성(electron transport characteristics)을 물성적으로 해석한다.

### 2. 볼츠만 2항 근사 방정식

기체 중에서 하전입자군의 수송계수를 측정하는 방법에는 2항근사와 다항근사 볼츠만 방정식 해법, 몬테칼로 시뮬레이션 기법과 같이 3가지 방법이 있다. 여기서 TOF(time of flight) 샘플링 방법을 이용하여 가스들의 전자수송계수들을 산출하는데 이용한 2항근사와 다항근사 볼츠만 방정식은 열평형 상태에서가 아닌 다입자계 운동의 기술을 이용해 이것을 전자군의 거동해석에 이용하고 있다. 볼츠만 방정식에서는 전자의 거동을 분포함수라는 거시적인 형태로 표시하고, 이 분포함수에서 전자수송계수를 산출한다. 전자의 속도분포함수를 Legendre급수로 전개하고 그 최초의 2항에 근사하는 2항근사는 전자수송계수를 산출하기 위한 소요시간은 비교적 짧은데 비해, 전자의 속도분포함수에 비등방성이 강한 경우에는 정확한 계수를 산출할 수 없는 단점을 가지고 있다.

### 3. 전자수송계수해석

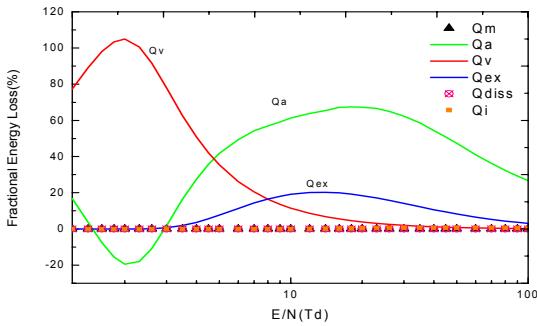
#### 3.1 전자이동속도



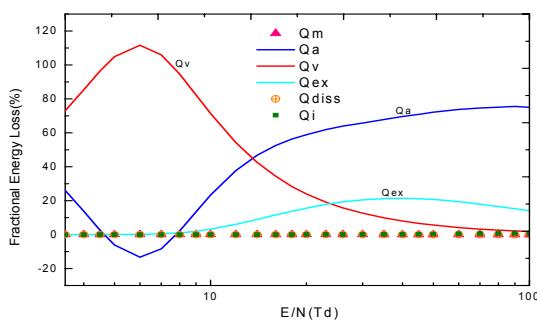
<그림 1> C<sub>4</sub>F<sub>6</sub>+Ar 및 순수 C<sub>4</sub>F<sub>6</sub>의 전자이동속도

그림 1은 2항근사 볼츠만 방정식 해석을 이용하여 계산한 C<sub>4</sub>F<sub>6</sub>+Ar 혼합가스 및 순수 C<sub>4</sub>F<sub>6</sub>의 전자이동속도를 PT(Pulsed Townsend) 실험법에 의해 측정된 A. N. Goyette, Yicheng Wang,a) and G. J. FitzPatrick[8]과 비교한 것이다. 0.1%, 1%의 C<sub>4</sub>F<sub>6</sub>가스와 Ar원자 가스를 혼합한 혼합가스의 경우 저에너지 영역에서 이동속도가 감소하는 부구배(NDC: Negative Differential Conductivity)가 나타났다. 이는 Ar원자ガ스의 RTM(Ramsaur Townsend Minimum)이 순수 Ar원자ガ스의 전자이동속도에 영향을 미치지 않았던 사실에 비추어 반드시 이러한 RTM의 영향으로 전자이동속도에서 NDC현상이 나타난다고 판단 할 수는 없고 C<sub>4</sub>F<sub>6</sub>의 운동량단면적이 RTM을 나타내는 영역에 운동량단면적보다 큰 진동여기단면적이 존재하기 때문에 이동속도가 감소하는 부구배(NDC: Negative Differential Conductivity)현상이 나타난다고 생각 할 수 있다. 또한 C<sub>4</sub>F<sub>6</sub>의 함량이 많을수록 C<sub>4</sub>F<sub>6</sub>의 진동여기단면적의 비탄성 충돌에 의해 전자이동속도가 높게 나타났다. 그림에서 보듯 실험치와 볼츠만 2항 근사 방정식을 이용한 수치계산으로 얻어진 결과는 큰 차이를 보였으며 이는 1-3C<sub>4</sub>F<sub>6</sub> 초기전자충돌단면적을 구성함에 있어서 Qv, Qdiss, Qex 값이 존재하지 않아 이와 유사한 구조를 가지는 c-C<sub>4</sub>F<sub>8</sub>의 값을 대체하여 사용함으로써 충돌단면적이 정확하지 않으며 Qa의 0.04ev이하의 값을 임의로 결정하여 사용하였기 때문에 이러한 결과가 나타났다고 보여진다. 또한 운동량변환단면적의 RTM이 낮은에너지 영역(1eV-5eV)에서 나타나고 이 구간에서 운동량변환단면적보다 큰 진동여기단면적이 존재하기 때문에 순수 상태에서 C<sub>4</sub>F<sub>6</sub>가스의 정확한 전자이동속도를 계산하기 어렵기 때문에 발생되는 것으로 생각된다.

#### 3.2 Initial Fractional Energy Loss



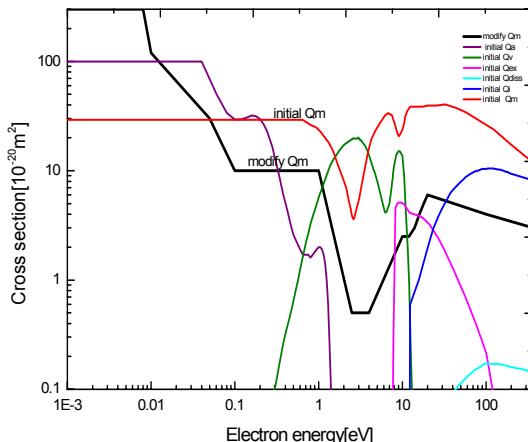
〈그림 2〉 Ar+0.1% C<sub>4</sub>F<sub>6</sub>에서의 Fractional Energy Loss



〈그림 3〉 Ar+1% C<sub>4</sub>F<sub>6</sub>에서의 Fractional Energy Loss

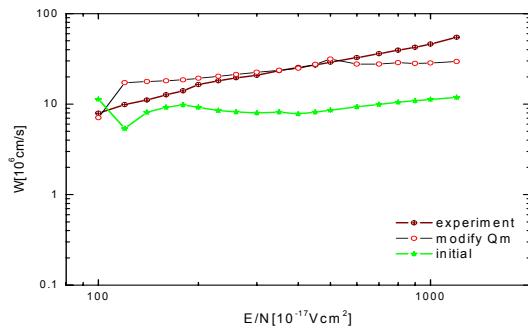
그림 2와 3은 Ar+C<sub>4</sub>F<sub>6</sub> 혼합가스의 C<sub>4</sub>F<sub>6</sub> Fractional Energy Loss를 보여주고 있다. 혼합가스의 경우 10Td이하의 낮은 에너지 영역에서 Qv에 의한 Energy Loss가 많이 발생함에 따라 1차적으로 C<sub>4</sub>F<sub>6</sub>의 전동여기단면적의 수정이 필요하다고 생각된다.

#### 4. 전자충돌단면적



〈그림 4〉 전자충돌단면적

그림 4는 본 연구에 사용된 C<sub>4</sub>F<sub>6</sub> 분자 가스의 전자충돌단면적으로 Qm, Qa, Qv, Qex, Qdiss, Qi로 구성되어 있다. Qv, Qex, Qdiss는 c-C<sub>4</sub>F<sub>8</sub>의 단면적을 대체 사용하였다. 1~5eV 범위에서 RTM을 갖는 운동량변환단면적이 존재하고 운동량변환단면적보다 큰 전동여기단면적이 존재한다. 또한 다른 원자, 분자에 비하여 매우 큰 전자 부착 단면적이 낮은 에너지 영역에 존재한다.



〈그림 5〉 순수 C<sub>4</sub>F<sub>6</sub>에서의 전자이동속도

그림 4와 5에서 보는 바와 같이 수정 전 Qm의 수정을 통하여 초기보다는 오차가 다소 줄어들었으나 정확한 단면적 산출을 위한 연구 진행이 요구되어지고 있다.

#### 5. 결 론

그림 1에서 보는 바와 같이 초기단면적에 의한 전자이동속도와 시험치의 이동속도간에 큰 오차가 발생하였다. 이는 초기전자충돌단면적을 구성함에 있어서 1-3C4F6의 Qv, Qdiss, Qex값이 존재하지 않아 이와 유사한 구조를 가지는 c-C4F8의 값을 대체하여 사용함으로써 충돌단면적이 정확하지 않으며 또한 Qa의 0.04ev이하의 값을 임의로 결정하여 사용하였기 때문에 이러한 결과가 나타났다고 보여진다.

처음 초기 충돌단면적에서 Qm값을 수정함으로써 초기단면적보다는 오차가 적은 이동속도를 구할 수 있었으며 이 역시 실험치와는 큰 오차가 발생하였다. 비탄성 충돌단면적에 의한 영향을 정확히 판단하기 위해서 Ar과의 혼합으로 저에너지 영역에서 진동여기 단면적의 수정이 필요하다고 생각이 된다. 그림 2와 3에서 보는 바와 같이 10Td이하의 구간에서 Qv에 의한 Energy Loss가 가장 크게 나타나기 때문에 추후 이 구간의 Qv 수정을 통해 실험치와 근사한 이동속도 값을 구할 수 있으리라 여겨진다.

#### [참 고 문 헌]

- [1] Shingo NAKAMURA, Mitsushi ITANO, Hirokazu AOYAMA, Kentaro SHIBAHARA1, Shin YOKOYAMA1 and Masataka HIROSE2, "Comparative studies of perfluorcarbon alternative gas plasmas for contact hole etch", Jpn. J. Appl. Phys. Vol. 42 (2003) pp. 5759 - .5764
- [2] 염근영, "플라즈마 쟈각 기술",
- [3] Czeslaw Szymkowiak and Stanislaw Kwitnewski, "Isomer effects on the total cross section for electron scattering from C<sub>4</sub>F<sub>6</sub> molecules", J. Phys. B: At Mol. Opt. Phys. 36 (2003) 4865 - 873
- [4] A.A. Christodoulides, L.G. Christophorou, R.Y. Pai, C.M. Tung, "Electron attachment to perfluorocarbon compounds. I. c-C<sub>4</sub>F<sub>6</sub>, 2-C<sub>4</sub>F<sub>6</sub>, 1,3-C<sub>4</sub>F<sub>6</sub>, c-C<sub>4</sub>F<sub>8</sub>, and 2-C<sub>4</sub>F<sub>8</sub>", J. Chem. Phys. 70, 1156-1167 (1979)
- [5] Mark Bart, Peter W. Harland,\* James E. Hudson and Claire Vallance, "Absolute total electron impact ionization cross-sections for perfluorinated hydrocarbons and small halocarbons", Received 17th November 2000, Accepted 3rd January 2001 First published as an Advance Article on the web 5th February 2001
- [6] Masahiro Yamaji and Yoshiharu Nakamura, "Swarm derived electron collision cross section set for the perfluorocyclobutane molecule", J. phys.D: appl.phys.37 (2004) 1525-1531
- [7] Masahiro Yamaji and Yoshiharu Nakamura, "Measurements of electron transport coefficients in the 0.468% and 4.910% c-C<sub>4</sub>F<sub>8</sub>/Ar mixtures and pure c-C<sub>4</sub>F<sub>8</sub>", J. Phys. D: Appl. Phys. 36 (2003) 640 - 44
- [8] A. N. Goyette, Yicheng Wang,a) and G. J. FitzPatrick, "Electron drift in C<sub>4</sub>F<sub>6</sub> and C<sub>4</sub>F<sub>6</sub> OAr mixtures", JOURNAL OF APPLIED PHYSICS, VOLUME 92, NUMBER 5
- [9] 하성철, 전병훈, "전자군 방법에 이용되는 2항근사와 다향근사 볼츠만 방정식의 적용", Jour. of the Korean Institute of Electrical and Electronic Material Engineers, Vol. 15, No. 1, P. 79, January 2002