한국반도체장비회지 제2권 제4호(2003년 12월)
Journal of the Korean Society of Semiconductor Equipment Technology, Vol. 2, No. 4. December 2003.

플라즈마 챔버의 특성 분석 및 최적 설계를 위한 가상의 시뮬레이션 환경 개발

김헌창† · 설용태*
†호서대학교 환경안전공학부 화학공학전공,
*호서대학교 전기전자공학부 전기공학전공

Development of Virtual Integrated Prototyping Simulation Environment for Plasma Chamber Analysis and Design (VIP-SEPCAD)

Heon Chang Kim† and Yong Tae Sul*
†Dept. of Chemical Engineering, Hoseo University,
*Dept. of Electrical Engineering, Hoseo University

ABSTRACT

This paper describes a newly developed simulation environment for analysis and design of a plasma processing chamber based on first principles including complicated physical and chemical interactions of plasma, fluid dynamics of neutrals, and transport phenomena of particles. Capabilities of our simulator, named VIP-SEPCAD (Virtual Integrated Prototyping Simulation Environment for Plasma Chamber Analysis and Design), are demonstrated through a two dimensional simulation of an oxygen plasma chamber. VIP-SEPCAD can provide plasma properties such as spatiotemporal profiles of plasma density and potential, electron temperature, ion flux and energy, etc. By coupling neutral and particle transport models with a three moment plasma model, VIP-SEPCAD can also predict spatiotemporal profiles of chemically reactive species and particles exist in plasma.

Key Words : Plasma Process, Plasma Simulation, Particles in Plasma, Oxygen Plasma

1. 서 론

반도체 산업의 고집적 회로 설계 기술에 수반되는 박막 처리 기술의 핵심은 박막 식각에 필수적으로 쓰이는 플라즈마 공정이다. 앞으로 차세대 반도체 생산에 있어서 지속적인 집적회로 선폭의 초 미세화와 웨이퍼의 대구경화에 따라 더욱 엄격히 요구되는 공정 조건을 만족시킬 수 있는 플라즈마 장비의 개발이 절실하게 요구되고 있다. 또한 급격히 발전하는 반도체 기술에 신속히 대처하기 위하여 개발 단계에서부터 플라즈마 장비의 성능을 예측하고 분석하여 개발 시간 및 비용의 절감은 물론 장비 성능의 극대화가 필요하다. 이는 실험적 방법과 함께 플라즈마 챔버의 내부에서 일어날 수 있는 여러 가지 복잡한 현상에 대한 이론적 모델의 시뮬레이션을 통한 플라즈마 장비의 종합적인 성능 분석을 효율적으로 함으로서 가능하다.

본 연구에서는 플라즈마 챔버의 내부에서 일어나는 물리 · 화학적 현상, 파티클의 생성 및 성장과 이동 현상 그리고 라디칼 및 양이온에 의한 박막 형성 및 식각 현상을 묘사할 수 있는 기초 이론적 모델의 정립과 함께 종합적으로 분석할 수 있는 가상의 시뮬레이션 환경, VIP-SEPCAD (Virtual Integrated Prototyping Simulation Environment for Plasma Chamber Analysis and Design)를 개발하고 있다.

2. VIP-SEPCAD의 구성

본 연구에서 개발하고 있는 VIP-SEPCAD는 Fig. 1에 나타낸 바와 같이 플라즈마의 물리 · 화학적 특성을 예측하는 plasma model, 중성 화학종들의 반응 및 유

†E-mail : heonchan@office.hoseo.ac.kr

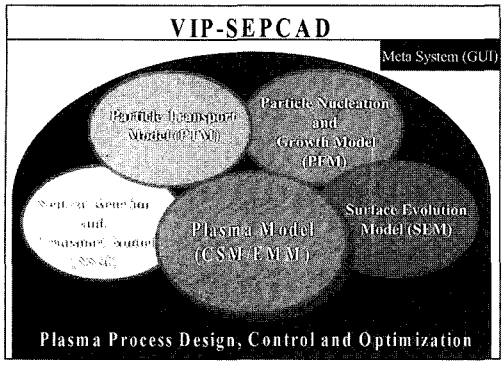

Fig. 1. VIP-SEPCAD Modules.

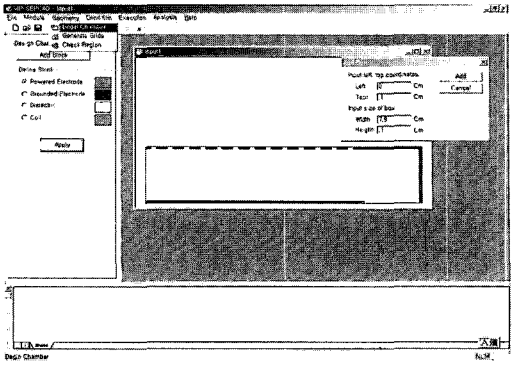

Fig. 2. VIP-SEPCAD GUI.

동 특성을 예측하는 neutral reaction-transport model, 파티클의 유동 특성을 예측하는 particle transport model, 파티클의 생성 및 성장 특성을 예측하는 particle formation-growth model, 웨이퍼 표면의 변화를 예측하는 surface evolution model로 구성되어 있다. VIP-SEPCAD를 구성하는 모델들은 수정 또는 추가가 용이하도록 모듈화하였으며 현재 완성된 모듈들은 다음과 같다.

– Charged Species Module (CSM): 플라즈마의 특성에 가장 영향을 많이 미치는 전자와 이온들의 거동 묘사는 신속하게 플라즈마 장비의 개발 및 설계, 운전 조건의 제어와 최적화에 필요한 변수들을 비교적 정확히 예측할 수 있는 Three Moment Model을 사용하였다[1].

– ElectroMagnetic Module (EMM): 전자와 이온들은 전기적 특성을 가지므로 전장에 의하여 영향을 가장 많이 받으며, 이에 따른 전자와 이온들의 거동은 다시 전장 형성에 영향을 미친다. 이러한 전장의 형성은 간략화된 Maxwell 방정식으로부터 계산될 수 있으며 CSM과 함께 플라즈마 시뮬레이션의 가장 중요한 부분이다[1].

– Neutral Species Module (NSM): 플라즈마 공정에서 전자의 중요한 역할들 중 하나는 전기적으로는 중성이지만 박막 처리에 직접 영향을 미치는 화학 반응성이 높은 라디칼과 metastable의 생성이다. 이러한 성분들의 총괄적인 거동은 Navier-Stokes식에 의하여 묘사되고 각 성분의 분포는 화학반응을 동반한 확산식에 의하여 계산된다[2].

– Particle Transport Module (PTM): 플라즈마 장비 안에는 수십 나노 미터에서 수십 마이크로 미터 크기의 수많은 파티클들이 존재하며 전자와 이온에 의하여 전하를 띄게 되어 이들의 거동은 유체의 흐름과 더불어 전기장과 플라즈마의 특성에 영향을 받는다. 이러한 파티클의 거동은 각각의 파티클에 작용하는 모든 힘들을 고려하여 Lagrangian 방식으로 추적된다[3].

또한 VIP-SEPCAD를 구성하는 각 모듈들은 GUI (Graphical User Interface) 하에 유기적으로 통합되어 사용자가 플라즈마 챔버의 구조 설계, 공정 조건의 입력, 필요한 모듈들의 선택을 수월하게 하고 시뮬레이션이 진행되는 동안 결과를 지속적으로 분석 할 수 있도록 하였다. Fig. 2에는 원료 가스가 상부 전극 showerhead의 pin hole들을 통하여 주입되는 Capacitively Coupled Plasma (CCP) 챔버의 구조를 2차원적으로 설계하는 VIP-SEPCAD 화면을 나타내었다.

3. VIP-SEPCAD를 이용한 산소 플라즈마 시뮬레이션

Fig. 2에서 설계된 플라즈마 챔버의 구조에서 CSM, EMM, NSM과 PTM을 이용하여 photoresist의 식각이나 산화막의 증착에 사용되는 산소 플라즈마에 대한 시뮬레이션을 수행하였다. 산소 플라즈마에는 electron impact reaction에 의하여 생성된 전자, 양이온(O_2^+, O^+), 음이온(O_2^-, O^-), 안정한 산소 분자 및 원자(O_2, O)와 함께 metastable ($O_2(a^1\Delta_g)$, $O_2(b^1\Sigma^+_g)$, $O(^1S)$, $O(^1D)$)들이 공존한다. Table 1에 나타낸 총 24종류의 electron impact reaction들과 함께 Table 2에 나타낸 총 24종류의 이온과 중성종 사이의 반응들을 고려하여 500 mTorr에서 웨이퍼가 놓이는 하단 전극에 150 V의 전압을 인가했을 때 시뮬레이션에 의하여 예측된 플라즈마 특성들을 Fig. 3에 나타내었다. 산소 플라즈마의 경우 전자의 밀도 분포를 보면 아르곤 플라즈마와 같은 electro-positive plasma와 달리 bulk plasma 영역에서 거의 균일하게 분포되어 있고 양이온과 전기적으로 준중성상태를 유지하려는 성분이 음이온인 electro-negative plasma의 특성을 지닌다. 또한 중성 성분의 밀

Table 1. Electron Impact Reactions in Oxygen Plasma

Momentum transfer	$e+O_2 \rightarrow e+O_2$
Rotational Excitation	$e+O_2 \rightarrow e+O_2(r)$
Vibrational Excitation (v=1)	$e+O_2 \rightarrow e+O_2(v=1)$
Vibrational Excitation (v=2)	$e+O_2 \rightarrow e+O_2(v=2)$
Vibrational Excitation (v=3)	$e+O_2 \rightarrow e+O_2(v=3)$
Vibrational Excitation (v=4)	$e+O_2 \rightarrow e+O_2(v=4)$
Metastable Excitation	$e+O_2 \rightarrow e+O_2(a^1\triangle_g)$
Metastable Excitation	$e+O_2 \rightarrow e+O_2(b^1\Sigma^+_g)$
Other Molecular Excitations	$e+O_2 \rightarrow e+O_2^*$
Dissociative Excitation (6.0)	$e+O_2 \rightarrow e+2O$
Dissociative Excitation (8.4)	$e+O_2 \rightarrow e+O+O(^1D)$
Dissociative Excitation (9.97)	$e+O_2 \rightarrow e+2O(^1D)$
Dissociative Excitation (14.0)	$e+O_2 \rightarrow e+O+O(^1S)$
Ionization	$e+O_2 \rightarrow 2e+O_2^+$
Ionization	$e+O_2 \rightarrow 2e+O^++O$
Dissociative Attachment	$e+O_2 \rightarrow O+O^-$
Ion Pair Formation	$e+O_2 \rightarrow e+O^++O^-$
Metastable Excitation	$e+O \rightarrow e+O(^1D)$
Metastable Excitation	$e+O \rightarrow e+O(^1S)$
Other Atomic Excitations	$e+O \rightarrow e+O^*$
Ionization (13.61, 16.93, 18.63, 28.49)	$e+O \rightarrow 2e+O^+$

도 분포를 보면 electron impact reaction에 의하여 생성된 산소 분자의 metastable인 $O_2(a^1\triangle_g)$가 기저 상태의 산소 원자 $O(^3P)$와 같이 웨이퍼가 놓이는 하단 전극에 많은 양이 도달한다. 이 결과로부터 photoresist를 식각하거나 산화막을 증착시킬 때 산소 분자의 metastable도 중요한 역할을 할 것이라 예측할 수 있다.

플라즈마를 이용하는 공정에서는 sputtering, homogeneous/heterogeneous reaction 등 여러 경로를 통하여 파티클이 발생할 수 있으며 파티클의 핵이 형성되면 응집이나 응축에 의하여 성장하게 된다. 본 논문에서는

Table 2. Reactions among Ions and Neutrals

$O^++O_2 \rightarrow O_2^++O$	$O_2^-+O_2(a^1\triangle_g) \rightarrow 2O_2+e$
$O^-+O_2 \rightarrow O_2^-+O$	$O_2^-+O_2(b^1\Sigma_g^+) \rightarrow 2O_2+e$
$O+O^- \rightarrow O_2+e$	$O^-+O_2(a^1\triangle_g) \rightarrow O_3+e$
$O+O_2^- \rightarrow O_2+O^-$	$O^-+O_2(b^1\Sigma_g^+) \rightarrow O+O_2+e$
$O+O_2^- \rightarrow O_3+e$	$2O+O_2 \rightarrow O_2(a^1\triangle_g)+O_2$
$O^-+O_2^+ \rightarrow O+O_2$	$O_2(a^1\triangle_g)+O \rightarrow O_2+O$
$O_2^-+O_2^+ \rightarrow 2O_2$	$O_2(b^1\Sigma_g^+)+O_2 \rightarrow 2O_2$
$e+O^- \rightarrow O+2e$	$O_2(b^1\Sigma_g^+)+O_2 \rightarrow O_2+O_2(a^1\triangle_g)$
$2O+O_2 \rightarrow 2O_2$	
$O(^1S)+O \rightarrow 2O$	$O_2(b^1\Sigma_g^+)+O \rightarrow O+O_2$
$O(^1S)+O_2 \rightarrow O+O_2$	$O_2(b^1\Sigma_g^+)+O \rightarrow O+O_2(a^1\triangle_g)$
$O(^1D)+O \rightarrow 2O$	
$O(^1D)+O_2 \rightarrow O+O_2(a^1g)$	$O(^1D)+O_2 \rightarrow O+O_2(b^1\Sigma_g^+)$

산소 플라즈마 환경에서 이미 성장된 파티클들의 거동에 대한 시뮬레이션을 수행하였다. 서두에 언급한 바와 같이 플라즈마 챔버의 내부에 존재하는 particle의 거동은 Fig. 3에 나타낸 플라즈마의 특성, 플라즈마 챔버 내부의 유체 흐름, 중력과 Brownian 운동에 의하여 영향을 받는다. Fig. 4는 파티클들이 주위에서 작용하는 다양한 힘에 의하여 유동하다가 정상상태에 도달했을 때 파티클의 크기에 따라 플라즈마 챔버의 내부에 분포되어 있는 형태를 나타낸다. 플라즈마 내에 존재하는 파티클들은 주위의 전자와 이온들이 표면에 축적되어 전체적으로 음전하를 띄게 된다. 플라즈마의 전위는 Fig. 3(a)에 보인 바와 같이 플라즈마 챔버의 벽보다 항상 높기 때문에 음전하를 띄는 파티클들은 plasma sheath에 생기는 강력한 전장에 의하여 작용하는 electrostatic force때문에 bulk plasma 쪽으로 밀리게 된다. 또한 양

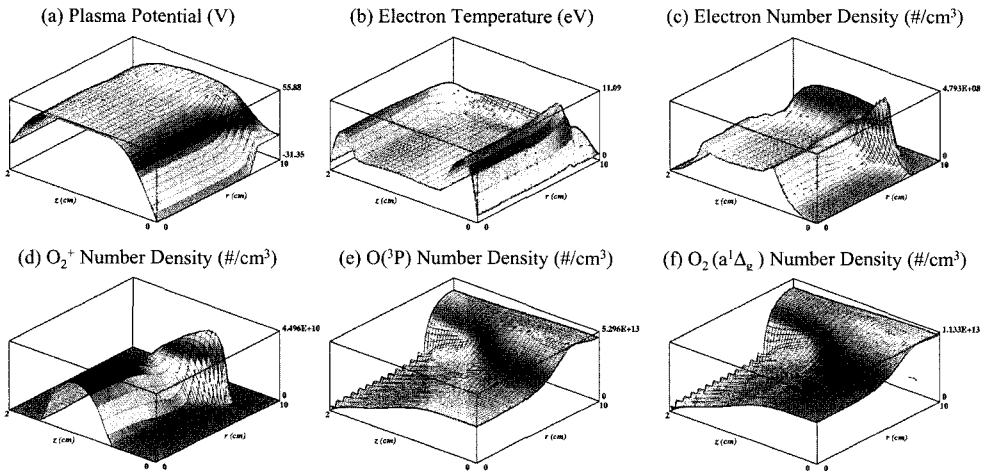

Fig. 3. Time-averaged Plasma Property Profiles in Oxygen Plasma Chamber.

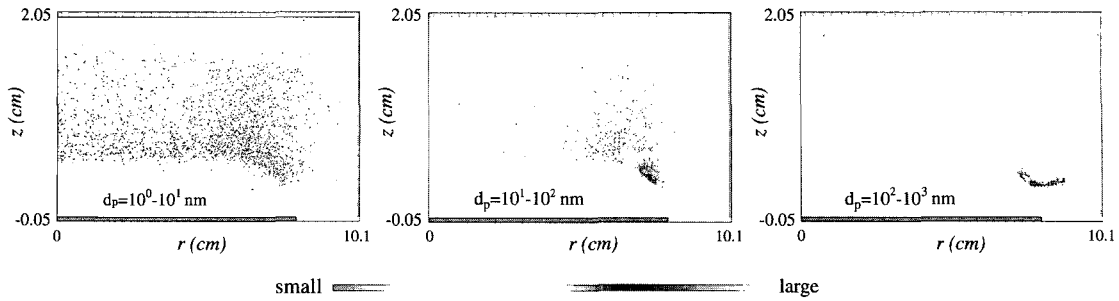

Fig. 4. Size Dependent Trapped Locations of Partcles in Oxygen Plasma Chamber.

전하를 띄는 이온이 bulk plasma에서 플라즈마 챔버의 벽 쪽으로 움직이며 파티클을 끌어가는 ion drag force의 영향을 받는다. 이와 더불어 gravitational force, neutral drag force와 Brownian force 등 모든 힘들이 평형을 이루는 곳에서 particle들이 모이게 된다. Fig. 4에 나타낸 바와 같이 비교적 큰 파티클들은 neutral force에 가장 영향을 많이 받아 공정가스가 빠져나가는 곳으로 따라가다 강력한 전장에 의하여 펌핑포트쪽으로 완전히 빠져나가지 못하고 웨이퍼가 놓이는 전극의 가장자리에서 축적됨을 알 수 있다. 특히 아주 작은 파티클들은 neutral drag force의 영향을 크게 받지 않고 Brownian force와 electrostatic force에 의하여 공정이 끝날 때까지 bulk plasma에 남아 있음을 알 수 있다.

4. 결 론

본 연구에서는 반도체 제조에 필수적으로 사용되는 플라즈마 장비의 개발 단계에서부터 성능을 예측 · 분석하여 개발 시간과 비용의 절감, 장비의 성능을 극대화 할 수 있는 종합적 시뮬레이션 환경인 VIP-SEPCAD를 개발하고 있다. VIP-SEPCAD의 활용예로서 CSM/EMM, NSM, PTM을 사용하여 산소 플라즈마의 특성 및 각종 화학적 활성종의 분포를 예측하고 파티클의 거동에 대하여 분석하였다. 현재 진행 중인 PFM과 SEM을 VIP-SEPCAD에 통합하여 주어진 플라즈마 공정 조건에 따라 웨이퍼 표면에 식각 및 증착에 의하여 생성되는 트렌치의 형태와 균일도의 예측으로 최적의 공정조건 도출과 파티클의 생성을 최대한 억제 또는 효과적으로 제거할 수 있는 기술 개발에 도움이 될 수 있을 것으로 기대된다.

감사의 글

본 연구는 한국과학재단 지정 지역협력연구센터인 호서대학교 반도체제조장비국산화연구센터의 연구지원과 과학기술부/산업자원부에서 시행한 시스템집적반도체기반기술개발사업에 의하여 수행되었으며 이에 감사드립니다.

참고문헌

1. Kim, H. C. and Manousiouthakis, V. I., "Simulation based plasma reactor design for improved ion bombardment uniformity," Journal of Vacuum Science & Technology B., Vol. 18, pp. 841-847 (2000).
2. Bird, R. B., Stewart, W. E. and Lightfoot, E. N., Transport Phenomena, 2nd Edition, John Wiley & Sons, Inc., New York, (2002).
3. Kim, H. C. and Manousiouthakis, V. I., "Dust transport phenomena in a capacitively coupled plasma reactor," Journal of Applied Physics, Vol. 89, pp. 34-41 (2001).