

## 유기실리콘분자의 해리과정에 관한 연구

### A study of organosilicon molecules dissociation in the plasma

윤용섭<sup>a\*</sup>, 강준<sup>b</sup>, 이명훈<sup>b</sup>

<sup>a\*</sup>한국해양대학교 기관시스템공학부(E-mail:ysyun@kmou.ac.kr),

<sup>b</sup>한국해양대학교 기관공학부

#### 1. 서론

지각의 주성분으로 알려져있는 SiO<sub>2</sub>(실리카)는, 수 GPa 정도의 경도, 실온에서 1012 Ωcm 이상의 고절연성, 가시광 영역에서 투명성, 화학적 안정성 등의 우수한 특성을 가지고 있어서 벌크재료로서의 이용 뿐만아니라, 광학기기, 반도체, 식품산업 등에서 박막재료로써 응용되어지고 있다[1-2]. 그 예로, 최근 ULSI(Ultra large-scale intergrated circuit) 반도체소자가 고집적화 및 고성능화 되어감에 따라 RC(Resistance-capacitance)신호 지연 및 간섭 문제가 심각하게 대두되고 있는데, 그 해답으로 이 SiO<sub>2</sub> 재료에 대한 관심이 급증하고 있는 추세이다. RC신호 지연현상은 Device의 동작속도에 커다란 악영향을 미치는 것으로써, 배선금속의 재질에 기인하는 배선지향(R)과 층간 절연막의 재질에 기인하는 배선간 용량(C)에 의해 정해진다. 이때문에 RC신호 지연문제의 향상을 위하여 Al 배선을 Cu로 치환하고, 층간절연막으로 SiO<sub>2</sub>막의 사용은 이전보다 75%의 향상효과를 얻을 수 있었다. 그러나 ULSI소자가 서브마이크론 이하로 고집적화함에 따라서 층간 절연막으로 상용화 되어있는 SiO<sub>2</sub>박막을 대체할 저유전율 박막의 개발이 필수적이며, 많은 연구자들에 의해 여러가지 새로운 유기물질 및 무기물질들이 제안되어지고 있다. 최근에는 실리카 박막에 원소 또는 관능기를 도핑함으로써 순 실리카 박막에서는 얻을수 없었던 특성을 부여한 SiO계 박막이 주목을 받고 있다. 그 예로써, SiO<sub>2</sub> 박막에 불소를 도핑하여 저유전율화를 실현한 SiOF 박막, 질소를 도핑하여 기계적 특성의 향상, 굴절을 제어할 목적으로한 SiON 박막, 그리고 탄화수소를 도핑하여 저유전율화 또는 발수특성을 부여한 SiOCH박막 등이 있다. 그 중에 반도체 공정상의 적합성을 고려하여보면, 알킬기를 함유한 SiO<sub>2</sub> 박막 (SiOCH)에 관심이 집중되고 있는데, SiOCH박막은 알킬기에 의해 형성된 나노스케일의 기공에 의해 작은유전율 특성을 갖는 재료이다. 특히 초발수막의 제작에 있어서는 많은 연구가 진행되어 그 응용에 기대되어지고 있다. 그러나 이러한 초발수막을 실용화시키기 위해서는 경도 및 밀착성과 같은 기계적 특성의 향상, 화학적 내구성의 부여, 광학특성의 제어 등과 같은 막 특성의 향상과 동시에, 원료, 기반, 성막장치의 특성, 전처리 등의 구축조건에의 대응이 필수불가결한 상황에 처해있다. 이를 실현하기 위해서는 요철구조의 원인이 되는 SiOCH계 나노클러스터의 형성과 그 바인더재료인 SiOCH박막의 형성 메커니즘을 명확하게 하고, 성막프로세스의 제어 및 모니터링 기술이 확립시켜야 하는 과제가 남아있다[3-4]

따라서 본 연구는 PECVD법에 있어서 분자동역학에 기초한 분자의 전자충격 해리에 대한 연구를 하였고, 이러한 현상을 통하여 유기실리콘 분자의 해리-재결합-클러스터링으로 이어지는 과정의 기초자료 및 설계지침을 제시하고자 한다.

#### 2. 본론

본 연구에서는 PECVD법에 있어서 전자충격에 의한 유기실리콘분자의 해리과정을 해석하기 위하여 분자동역학에 기초한 컴퓨터 시뮬레이션에 의한 Trimethylmethoxysilane(TMMOS; (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>SiOCH<sub>3</sub>) 및 Hexamethyldisiloxane(HMDSO; (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>SiOSi(CH<sub>3</sub>))의 전자궤도를 계산하였다. 또한 Quadrupole mass spectrometer(QMS)에 의해 유기실리콘 분자의 전자충격 해리과정을 분석하였다. 즉, 플라즈마 중 가장 기초적인 유기silane 분자의 전자충돌에 의한 해리과정을 살펴봄으로써 SiOCH 박막의 생성 메커니즘의 기초자료를 제공하고자 하였다. 다양한 플라즈마원에서의 해리과정을 해석하기 위하여 ICP(Inductively Coupling Plasma)와 CCP(Capacitively Coupling Plasma) 타입의 PECVD 시스템을 이용하였다. 원료분자의 해리 및 재결합과정을 설명하기 위하여 플라즈마 분광분석 및 QMS를 이용하였다. 그리고 생성막의 화학결합상태를 규명하기 위하여 FT-IR을 이용하였다.

#### 3. 결론

본 연구에 의해 다음과 같은 결론을 얻었다.

1. 반경험적 분자궤도법과 같은 컴퓨터 시뮬레이션에 의하여 원재료인 Trimethylmethoxysilane 및 Hexamethyldisiloxane의 전자궤도를 분석한 결과, Si 원자에 직접 연결된 Methyl group의 결합력이 가장 약했다.
2. 그로 인해 두 유기실리콘 분자의 전자충격에 의한 원료의 분해도가 상이함을 확인했다.

#### 참고문헌

1. Y. T. Kim, D. S. Kim and D. H. Yoon, Thin Solid Films, 475 (2005) 271.
2. K. Teshima, H. Sugimura, Y. Inoue and O. Takai, A. Takano, Langmuir, 19 (2003) 8331.
3. S. C. Deshmukh and E. S. Aydil, J. Vac. Sci. Technol. B, 14 (1996) 738.
4. H. Chatham, Surf. Coat. Technol., 78 (1996) 1.