제1원리와 실험을 통한 인산기반 용액을 이용한 Si_3N_4/SiO_2 선택적 식각 메카니즘 규명

박태건, 임상우†
연세대학교
(swlim@yonsei.ac.kr†)

Si_3N_4와 SiO_2는 유전체로서 반도체 디바이스 제작에 있어 널리 쓰이고 있다. 특히 화두가 되는 3D V-NAND flash memory 제작에 있어 두 물질이 적층된 구조가 이용되는데, 이때 SiO_2 대비 Si_3N_4를 선택적으로 식각하는 것이 중요하다. 현재 산업에서 주로 이용되는 식각액은 인산 계열이다. 그러나, 인산이 어떻게 선택적으로 Si_3N_4를 식각하는지에 대한 정확한 규명은 부족한 상태이다. 이에 본 연구에서는 제1원리 기반 DFT 계산과 simulation을 통한 분자 단위 움직임과 반응에 대해 파악하고 이를 바탕으로 식각에 영향을 미치는 바를 파악한 후 실험을 진행하여 메커니즘을 밝히는 연구를 진행하였다.
반응에 참여하는 인산과 물들의 분자단위 역할을 파악하기 위해서 제1원리 기반으로 Si_3N_4 구조를 DFT를 통하여 제작하였다. 우선 표면 반응에 대해 반응물들의 접근을 통해 Si_3N_4 의 표면 종단기들이 주로 –OH 기 등으로 바뀌며 바뀐 종단기들에 의해 에너지가 안정됨을 확인하였다. 내부 반응의 경우 전체적인 반응이 nucleophile(친양자체)들에 의한 Sn_i 반응이라고 생각되며, 단계적으로 생성되는 중간체들 그리고 transition state 에 대한 에너지 계산을 통해 자발성을 파악하였으며, 반응물들이 식각에 어떤 형태로 기여하는지를 파악하였다. 최종적으로 실제 실험에 의한 값과 비교를 통해 반응 메커니즘을 살펴보았다