

## ZEP520 포토리지스트를 이용한 나노 패턴 형성을 위한 전자빔 리소그래피 공정 모델링 및 시뮬레이션

손 명 식<sup>†</sup>

<sup>†</sup>순천대학교 전자공학과 반도체 TCAD 연구실

### Modeling and Simulation of Electron-beam Lithography Process for Nano-pattern Designs using ZEP520 Photoresist

Myung Sik Son<sup>†</sup>

<sup>†</sup>Semiconductor TCAD Laboratory, Department of Electronic Engineering, Sunchon National University

#### ABSTRACT

A computationally efficient and accurate Monte Carlo (MC) simulator of electron beam lithography process, which is named SCNU-EBL, has been developed for semiconductor nanometer pattern design and fabrication. The simulator is composed of a MC simulation model of electron trajectory into solid targets, an Gaussian-beam exposure simulation model, and a development simulation model of photoresist using a string model. Especially for the trajectories of incident electrons into the solid targets, the inner-shell electron scattering of a target atom and its discrete energy loss with an incident electron is efficiently modeled for multi-layer resists and heterogeneous multi-layer targets. The simulator was newly applied to the development profile simulation of ZEP520 positive photoresist for NGL(Next-Generation Lithography). The simulation of ZEP520 for electron-beam nanolithography gave a reasonable agreement with the SEM experiments of ZEP520 photoresist.

**Key words :** Electron-beam lithography, Nanolithography, Photoresist, ZEP520, Monte Carlo Simulation

#### 1. 서 론

전자빔을 이용 웨이퍼 상에 집적회로 미세 레이아웃 패턴을 전이하기(transferring) 위한 전자빔 리소그래피(electron-beam lithography) 공정 기술은 포토마스크 제작 이외에도 차세대 고해상도 나노 크기의 반도체 패턴을 직접 묘화(direct writing)함으로써 한층 그 사용이 빈번해지고 있다. 문제점으로 지적되고 있는 나노 패턴 형성시 기관의 후방산란(back-scattering) 효과 및 미세 패턴 간의 전자빔 근접 효과(proximity effect)를 보정하기 위한 전자빔 리소그래피 몬테 카를로(Monte Carlo) 시뮬레이션 방법은 다양한 타겟 기관 층에 대한 후방 산란 효과와 미세 패턴 근접 효과 등을 물리적으로 타당하며 보다 정확하게 예측할 수 있기 때문에 이

에 대한 많은 모델들이 개발되어져왔다[1-9]. 대표적인 상업 제품으로는 SIGMA-C사의 SELID 프로그램(독일 제품)[10]이 현재 국내에서 판매되고 있으며, 이 제품은 몬테 카를로 모델 보다는 볼츠만(Boltzmann) 수송 방정식을 이용해 그 수행 시간을 단축하여 리지스트 전이 에너지를 계산함으로써 최적의 집적 리소그래피 공정에 대한 노광(exposure) 및 현상(development) 공정 조건을 찾아 주고 있다.

그러나 이러한 모델들의 대부분은 2층, 3층 및 4층 리지스트 층들이 있는 다층 구조에서의 시뮬레이션 에는 그 적용이 부적합하다. 이러한 다층 구조의 리지스트 및 에피층들을 갖는 기관 층에서의 전자빔 후방 산란 등을 고려하여 리지스트에 전이되는 에너지 분포를 정확히 계산하여 분석하고 근접 효과(proximity effect)를 보정하여 최적의 노광 및 현상 조건을 제시하기 위해서는 기존의 단원자 단층 시스템에서의 몬테 카를로

<sup>†</sup>E-mail : sonms@sunchon.ac.kr

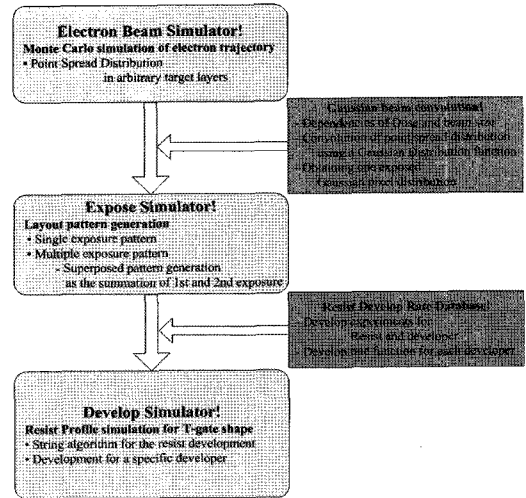
산란 모델을 수정하여 새로운 다층 다원자 모델을 제시할 필요가 있다.

본 논문에서는 다층 리지스트 구조 및 다원자 다층 구조에서 전자 궤적을 구해 전이 에너지 분포를 계산하기 위한 컴퓨터 계산에 있어서 효율적인 몬테 카를로 전자빔 노광 공정 시뮬레이터의 구성과 스트링(string) 모델[2]을 사용한 포토리지스트(photoresist) 현상 시뮬레이터 구성에 대하여 논의하고 그 시뮬레이션 결과를 분석하였으며, 특히 차세대 나노리소그래피를 위한 ZEP520 양성 포토리지스트에 대해 모델링 및 시뮬레이션을 수행하여 그 결과를 분석하였다.

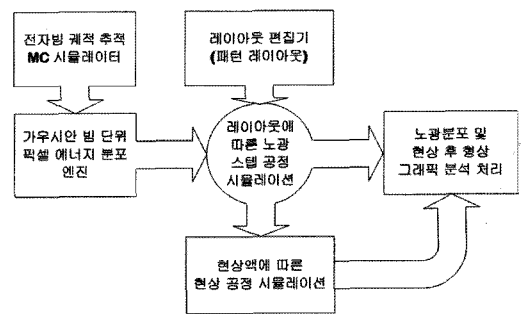
## 2. 전자 산란에 대한 몬테 카를로 시뮬레이션 모델

기존 모델은 높은 에너지에서 유도된 Rutherford 산란 방정식[4]을 사용하였기 때문에 낮은 에너지에서의 실험결과와 일치하지 않았다. 또한 낮은 에너지에서의 2차 생성 전자에 의한 에너지 전이 분포의 분산 효과를 표현하지 못하였다. 그러나 여기서 제안한 시뮬레이션 모델은 고에너지 모델(Rutherford 산란 방정식)에 더하여 저에너지 모델을 물리적으로 타당하게 모델링함으로써 저에너지 모델에서의 문제점을 해결하고, 근접 효과와 후방 산란 효과 등을 정확하게 효율적으로 시뮬레이션하기 위한 패턴 전이를 위한 전자빔 리소그래피 묘화 공정 분석에 적합할 것이다. 또한 다원자 다층 기판 구조에서의 전자 산란 궤적을 구하기 위한 제안된 몬테 카를로 시뮬레이션 모델은 1차 및 2차 생성 전자들을 모두 고려한 복합 산란 모델을 토대로 하며, 리지스트 층에 전이 흡수된 정확한 에너지 분포를 구하기 위하여 고 에너지[4] 및 저 에너지 전자의 산란 메커니즘들[7][13]을 고려하였다.

그림 2에서 보인 바와 같이 저 에너지 탄성 산란에서는 Mott의 산란 단면적(scattering cross-section)을 사용하였고, 저 에너지 비탄성 산란에서 몬테 카를로 전자 산란 모델은 크게 두 부분으로 이루어진다. 하나는 원자의 최외각 전자인 자유 전자에서의 Moller 산란 단면적과 원자와의 결합 에너지가 큰 내부 전자 에너지 궤도(inner-shell electrons)에서의 Vriens 산란 단면적이다. 수정된 Moller 단면적은 최외각 전자(outer-shell electrons)가 매우 낮은 결합 에너지를 가지고 있기 때문에 자유전자로 가정하여 산란 단면적을 계산하고 있으며, Vriens 산란 단면적은 이 보다 큰 결합 에너지를 가는 내부 에너지 궤도 전자의 이온화(ionization)을 고려하고 있다. 즉, 핵과의 탄성 산란 메커니즘과 비탄성 산란 메커니즘들인 내부 셸(inner shells) 전자



(a)



(b)

그림 1. 전자빔 리소그래피 공정 모델링에 따른 (a) 시뮬레이터 구성 및 (b) 시뮬레이션 흐름도

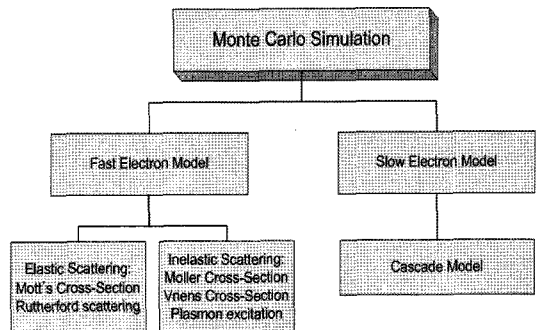


그림 2. 전자 산란 몬테 카를로 모델

와의 산란 및 최외각 셸(outermost shell) 전자에 대해 자유전자로 가정된 최외각 궤도의 자유 전자와의 산란, 그리고 자유 전자 구름에 의한 플라즈몬(plasmon) 진

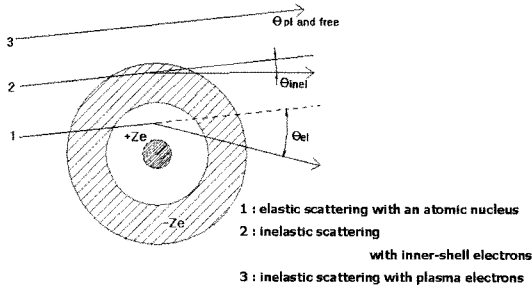


그림 3. 고체 타겟 원자와 전자와의 탄성/비탄성 산란

동에 의한 에너지 손실 메커니즘을 모두 고려하였다.

그림 3은 앞에서 언급한 산란 모델의 형태를 도식적으로 보여준다. 저 에너지 모델링을 위한 시뮬레이터에서의 에너지 전이 손실 모델은 근본적으로 Joy 와 Luo 에 의하여 수정된 Bethe 방정식이며, 이것을 토대로 자유전자와 내부 궤도 전자들의 이온화 및 플라즈몬(plasmon) 여기(excitation) 과정을 포함하는 이산 과정들을 모두 고려함으로써 각 층에서의 전이 에너지 분포에 대한 저 에너지에서의 에너지 전이 분산효과를 고려한 시뮬레이션을 수행할 수 있다. 또한 기관으로 들어가는 전자 산란 궤적을 모두 추적 시뮬레이션함으로써 기관 원자들에 의한 후방 산란 효과가 고려된 포토리지스트 층으로의 에너지 전이 분포를 정확하게 계산할 수 있다. 그림 3에서는 에너지를 갖고 입사한 전자가 타겟(target) 층의 원자들과 탄성 및 비탄성 산란을 통해 방향이 바뀌면서 에너지를 잃어 가는 과정과 에너지를 전이하는 개념도를 나타내었다. 여기에서 보인 각 산란과정에 대한 모델은 아래 소절들에서 자세히 설명한다.

### 2.1. 탄성 산란

그림 3에서 1번으로 표기된 산란 과정은 원자핵과의 탄성 산란 과정을 묘사하며 비교적 큰 방향 변화를 일으키게 된다. 탄성 산란은 부분적인 파동 확장 방식에 의한 Mott 산란 단면적에 기초하고 있다. Mott 산란 단면적은 특히 저 에너지와 원자번호가 큰 원자에서 보다 정확한 결과를 보여준다고 알려져 있다. 30 keV 이하의 에너지 범위에 대해 Browning이 제안한 Mott 산란 단면적을 사용하였고, 모델 방정식은 식(1)과 같으며, 산란각은 식(2)에 의하여 간단하게 결정할 수 있다.

$$\sigma_M = \frac{3 \times 10^{-18}}{(E + 0.005Z^{1.7}E^{0.5} + 0.0007Z^2/E^{0.5})} [\text{cm}^2] \quad (1)$$

$$\cos\theta = 1 - 2aR^2/(1 + \alpha - R) \quad (2)$$

여기서  $Z$ 는 원자번호,  $E$ 는 전자에너지,  $\alpha = 3.4 \times 10^{-3} Z^{0.67}/E$ 이며,  $R$ 은 난수(random number)이다.

### 2.2. 비탄성 산란

그림 3의 2번 산란과정은 원자에 강하게 속박되어 있는 내부 전자 에너지 셸(궤도)전자와의 충돌에 의해 에너지를 전이 받아 내부 궤도 셸을 벗어나 에너지가 높은 상태의 자유전자 상태가 되는 이온화(ionization) 산란 과정을 보여준다. 이때 이온화 산란 과정에 의해 2차 생성전자가 발생하게 되며 1차 전자는 방향이 바뀐다. 비탄성 산란 단면적은 두개의 여기 단면적으로 구성된다. 그중 하나는 Moller 산란 단면적의 변형인 자유 전자의 산란 단면적이고 다른 하나는 Vriens 산란 단면적이다.

자유전자 여기에서의 수정된 Moller 미분 산란 단면적과 이에 의한 자유전자 Moller 산란 단면적은 다음과 같이 표현된다.

$$\left[ \frac{d\sigma_{free}}{d\varepsilon} \right]_M = \frac{\pi e^4}{E^2} \left\{ \frac{1}{\varepsilon^2} + \frac{1}{(1-\varepsilon)^2} - \frac{1}{\varepsilon(1-\varepsilon)} \right\} \quad (3)$$

$$\sigma_{free} = \int_{\varepsilon_c}^1 \left[ \frac{d\sigma}{d\varepsilon} \right]_M d\varepsilon = \frac{\pi e^4}{E^2} \left\{ \frac{1}{\varepsilon_c} - \frac{1}{1-\varepsilon_c} + \ln \left( \frac{\varepsilon_c}{1-\varepsilon_c} \right) \right\} \quad (4)$$

여기서,  $e$ 는 음전하량,  $\varepsilon$ 은 전자 에너지  $E$ 에 의하여 정규화된 전이 에너지이다.

자유전자로의 낮은 임계 에너지 전이를  $\varepsilon_c$ 로 정하며,  $\varepsilon_c$ 는  $\Delta E_c/E$ 로 정의되는 변수이다. 여기서  $\Delta E_c$ 는 20 eV로 설정 하였고, 이는 플라즈몬 에너지 보다 높은 값이다. 만약  $\varepsilon_c$ 를 상수로 사용한다면, 저 에너지에서 2차 전자생성은 과도하게 산출될 것이다.

내부 셸 궤도의 결합에너지를 고려하는 Vriens 산란 단면적은 내부 셸 전자 여기를 위해서 사용된다. 미분 단면적은 다음과 같이 표현된다.

$$\frac{d\sigma_i}{d\varepsilon} = \left[ \begin{aligned} &\frac{1}{\varepsilon^2} + \frac{4U_i}{3\varepsilon^2} + \frac{1}{(1+U_i-\varepsilon)^2} \\ &+ \frac{4U_i}{3(1+U_i-\varepsilon)^2} - \frac{\Phi}{\varepsilon(1+U_i-\varepsilon)} \end{aligned} \right] \quad (5)$$

$$\Phi = \cos \left\{ - \left( \frac{R_y}{1+U_i} \right)^{1/2} \ln U_i \right\} \quad (6)$$

여기서,  $\sigma_i$ 는 전제 이온화 단면적,  $U_i$ 는  $E$ 에 의해서 표준화된  $i$ 번째 궤도 전자이다. 그리고  $R_y$ 는  $E$ 에 의해서 표준화된 Rydberg 에너지이다.

결합에너지  $U_i=0$  그리고  $\Phi = 0$  일 때, Vriens 미분 산란 단면적은 수정된 자유전자 Moller 산란 단면적이 되며, Vriens 산란 단면적은 쉽게 구할 수 있다. Vriens 미분 산란 단면적은 다음과 같은 형태로 사용된다.

$$\sigma_i = \frac{\pi e^4}{E^2(1+2U_i)} \left( \frac{5}{3U_i} - 1 - \frac{2}{3}U_i + \frac{\Phi \ln U_i}{1+U_i} \right) \quad (7)$$

### 2.3. 에너지 손실과 플라즈몬 여기

그림 3의 3번 산란 과정은 전자구름(free-electron cloud)으로 묘사되는 전자 플라즈마(plasma) 상태에서의 전자들과의 플라즈마 여기 산란 과정을 나타낸다. 3번 산란과정은 두 가지 산란 과정으로 구성된다. 그 하나는 그림에서 'free'로 표기된 하나의 자유전자(single free electron)와의 산란 과정을 나타낸다. 이때의 자유전자는 최외각 전자를 나타내며, 최외각 전자의 결합 에너지(binding energy)는 내부 전자의 결합 에너지에 비해 작으므로 쉽게 산란에 의해 원자에서의 구속 상태를 벗어나 2차 생성전자로 산란해 나갈 수 있다. 이것을 자유 전자(최외각 전자)와의 산란 과정으로 묘사하며 이것을 내부 쉘 전자들의 이온화와 구분하여 여기(excitation)라고 표현한다. 이때 이러한 최외각 전자와의 산란 과정에 의해 1차 주입 전자는 방향이 바뀌며 산란에 의해 최외각 전자는 2차 생성전자가 된다. 그리고 또 하나는 플라즈몬(plasmon) 진동에 의한 비탄성 산란 과정이다. 이 과정은 유체 속을 비교적 가벼운 구가 운동할 때 구의 체적만큼의 유체 변화량이 발생하게 되고 이것이 전체 유체의 진동(plasmon)을 야기하는 형태로 근사화해 그려 볼 수 있다. 이때에 진행 방향은 바뀌지 않고 진동을 발생시키는 만큼의 에너지 손실만 있다고 가정한다.

따라서 전체 에너지 손실은 자유전자 여기 손실, 내부 궤도(셸) 전자 이온화 손실, 그리고 플라즈몬 에너지 손실로 구성되며, 이는 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\left[ \frac{dE}{ds} \right]_{Total} = \left[ \frac{dE}{ds} \right]_{free} + \left[ \frac{dE}{ds} \right]_{tinner} + \left[ \frac{dE}{ds} \right]_{plasmon} \quad (8)$$

산란 거리에 따른 전체 에너지 손실은 아래의 CSDA (Continuous Slowing Down Approximation) 가정에 의한 수정된 Bethe 방정식을 사용하여 아래와 같이 계산할 수 있다.

$$\left[ \frac{dE}{ds} \right]_{Total} = 2\pi e^4 \times \frac{\rho Z}{AE} \times \ln \left( \frac{1.166E}{J} \right) (KeV/\mu m) \quad (9)$$

여기서  $\rho$ 는 밀도,  $Z$ 는 원자 번호,  $A$ 는 원자 무게이다.  $J$ 는 이온화 포텐셜(potential)을 의미하며, 수정된 평균

이온화 포텐셜은  $J'=J/(1+kJ/E)$ 로 표현되며,  $k=0.734Z^{0.037}$ 이다.

플라즈몬 에너지 손실을 나타내는 식을 제외한다면 다른 에너지 손실은 다음과 같은 이산 에너지 손실 식 (10)[1]으로부터 구할 수 있다.

$$\begin{aligned} & \left[ \frac{dE}{ds} \right]_{inner} + \left[ \frac{dE}{ds} \right]_{free} \\ &= \sum NZ_i \int_{U_i}^{(1+U_i)^2} E \varepsilon \left[ \frac{d\sigma}{d\varepsilon} \right]_v d\varepsilon + NZ_f \int_{\varepsilon_c}^{J^2} E \varepsilon \left[ \frac{d\sigma}{d\varepsilon} \right]_M d\varepsilon \\ &= \frac{\pi e^4 N}{E} \sum \frac{Z_i}{1+2U_i} \left\{ \frac{2}{3} - 3 \ln 2 + \frac{1}{3}(1+U_i) \right. \\ & \quad \left. \times (1-2U_i) + 3 \ln(1+U_i) - \ln U_i \right\} \\ & \quad + \frac{\pi e^4 N}{E} Z_f \left\{ 2 - 3 \ln 2 - \frac{1}{1-\varepsilon_c} - 2 \ln(1-\varepsilon_c) - \ln \varepsilon_c \right\} \end{aligned} \quad (10)$$

여기서  $N$ 은 단위 체적 당 원자의 갯수,  $Z_i$ 는  $i$ 번째 궤도 전자의 개수,  $Z_f$ 는 자유전자 궤도의 개수이다.

플라즈몬 에너지 손실은 CSDA에 의한 수정된 Bethe 방정식 (11)로부터 아래와 같이 구할 수도 있다.

$$\left[ \frac{dE}{ds} \right]_{plasmon} = \left[ \frac{dE}{ds} \right]_{Total} - \left[ \left[ \frac{dE}{ds} \right]_{free} + \left[ \frac{dE}{ds} \right]_{inner} \right] \quad (11)$$

플라즈몬 여기의 평균 자유행정 및 산란 단면적은 다음과 같다.

$$\frac{1}{n_e \times \sigma_{plasmon}} = \lambda_{plasmon}(E) = \hbar \omega_{pl} \left[ \frac{dE}{ds} \right]_{plasmon} \quad (12)$$

여기서  $n_e$ 는 단위체적당 최외각전자의 개수이며, 플라즈몬 에너지  $\hbar \omega_{pl}$  ( $\hbar \omega_{pl} = \hbar \sqrt{Ne^2/\varepsilon_0 m}$ )에 의해 계산된다. 여기서  $N$ 은 단위체적당 최외각전자의 개수이다. 플라즈몬 에너지는 Si에서 16.6 eV, PMMA에서 19.8 eV로 계산된다.

총 평균 자유 행정은 다음의 식(13) 관계에 의해서 구하며, 모든 산란은 확률에 의해 난수로 결정되는 이산(discrete) 산란으로 구성된다.

$$\frac{1}{\lambda_{Total}} = \frac{1}{\lambda_{elastic}} + \frac{1}{\lambda_{free}} + \frac{1}{\lambda_{inner}} + \frac{1}{\lambda_{plasmon}} \quad (13)$$

이상의 모델들에서 고체 타겟 속의 원자들과의 전자 산란 과정은 총 산란 길이에 대한 각 이산 산란 길이의 비인 각 산란 확률에 따라 발생된 임의의 난수를 통해 각 산란을 선택하고 3차원 산란각과 전자의 에너지 손실 및 궤적을 정지 임계 에너지 20 eV까지 추적하여 전자들의

전이 에너지 분포에 대한 통계적 분포를 얻게 된다.

#### 2.4. 다층 다원자 몬테 카를로 시뮬레이션 모델

이와 같은 몬테 카를로 시뮬레이션은 효율적인 전자빔 산란 궤적 계산 수행을 위하여 미리 에너지 및 층을 구성하는 개별 원자에 따른 비탄성 충돌 파라미터와 탄성 충돌 파라미터를 모두 계산하였고, 산란 궤적 수행을 위한 반복 루프 실행 과정에서는 미소 에너지 증분에 대해 미리 테이블화하여 메모리에 저장된 값을 불러서 사용토록 하였다. 리지스트에 전이되는 정확한 에너지 분포를 계산하기 위하여 전자가 층을 바꾸어 산란되어 가는 경우에는 산란 궤적을 층별로 구분하여 각 층에 맞는 산란 파라미터를 적용한 전이 에너지의 합으로 리지스트 층의 전이 에너지를 구하는 알고리즘 [6]을 사용하였다.

비탄성 산란 중 내부 셀에 있는 전자와의 산란 메커니즘은 화합물에 대해 하나의 개별 원자처럼 취급할 수 있는 유효 전자번호 [2-3]를 이용하여 구할 수도 있으나 유효 전자를 사용하는 경우에는 각 셀들을 재조정하여 각 셀에 전자 수를 할당하여 주어야 하고 [2], 이 과정에서 임의 조정이라는 비물리적인 변수가 발생하게 되므로 이보다는 아래에서 설명하는 다원자 화합물 층의 전체 산란 단면적 대 하나의 개별 원자에 대한 내부 셀들의 산란 단면적의 합의 확률을 이용해 구성 원자를 결정하는 새로운 방법을 사용하여 모델링하였다. 이러한 새로운 접근법은 주기율표상의 모든 단일 원자들에 대한 결합 에너지와 각 셀의 전자 수에 대한 데이터 값들 [11]을 변형 없이 그대로 데이터를 이용할 수 있으므로 화합물 반도체에서 유효 전자번호를 사용했을 때의 비 물리적인 요소(재배열 및 그에 따른 결합 에너지 결정)에 대한 오류를 제거할 수 있어 어떠한 화합물이라도 시뮬레이션이 용이하도록 구성할 수 있다.

위에서 언급된 바와 같이 다원자 다층 기판에서의 비탄성 산란 메커니즘을 결정하기 위하여 기본적으로는 Vriens의 산란 단면적을 이용하였으나, 단일 원자와 같이 취급하기 위한 유효 전자번호를 사용하는 경우에는 각 셀의 전자들을 어떻게 배분하여 재배치하느냐는 문제에 이르게 된다. 이것은 시뮬레이션마다 굉장히 임의적인 오류를 나올 수 있고, 또한 전자가 쪼개어지는 사태에 이르게 되어 물리적으로 타당하지 않은 요소를 포함하고 이것에 따른 정확한 결합 에너지의 결정 또한 쉽지 않은 문제이다. 이러한 문제들을 해결하고 효율적으로 임의의 다원자 다층 구조에서도 물리적으로 타당하며, 시뮬레이션이 용이하도록 다음에서 설명하는 방법을 이용하여 효과적인 계산을 유도하였다.

다원자로 구성된 화합물 각 층에서의 총 산란 단면적( $\sigma_{Total}$ )은 식 (14)와 같이 탄성 산란 단면적( $\sigma_{elastic}$ ) 및 비탄성 산란 단면적( $\sigma_{inelastic}$ )의 합이므로 탄성 산란 확률( $\sigma_{elastic}/\sigma_{Total}$ ) 및 비탄성 산란 확률( $\sigma_{inelastic}/\sigma_{Total}$ )을 손쉽게 구할 수 있다. 0과 1 사이에 고르게 분포하는 난수를 발생시켜 탄성과 비탄성 산란 메커니즘을 결정할 수 있다. 각 층에서의 비탄성 산란 단면적( $\sigma_{inelastic}$ )은 각 층의 구성 개별 원자의 비탄성 산란 단면적의 총합( $\sigma_{inner}$ )과 최외각 자유전자 셀에 대한 산란 단면적( $\sigma_{free}$ ), 그리고 플라즈몬 여기에 대한 산란 단면적( $\sigma_{plasmon}$ )의 합으로 식 (15)와 같이 나타낼 수 있다. 또한 플라즈마 산란각은 식 (18)에 의해 구할 수 있으며, 플라즈마 상 태에서의 하나의 자유전자와의 산란은  $\sigma_{single} = \sigma_{free}$ 로 가정하였다.

$$\sigma_{Total} = \sigma_{elastic} + \sigma_{inelastic} \quad (14)$$

$$\sigma_{inelastic} = \sigma_{inner} + \sigma_{free} + \sigma_{plasmon} \quad (15)$$

$$\sigma_{inner} = \sum_k (N_k \sum_i (Z_i^k \sigma_i^k)) \quad (16)$$

$$\sigma_{free} = \sum_k (N_k Z_f^k \sigma_f^k) \quad (17)$$

$$\sigma_{plasma} = \sigma_{plasmon} + \sigma_{single} = \sigma_{plasmon} + \sigma_{free} \quad (18)$$

여기서,  $Z$ 는 셀의 전자수이고,  $N$ 은 원자 농도를 나타내며,  $\sigma$ 는 산란 단면적이다.  $k$ 아래 첨자는 각 화합물의 구성 개별 원자를 의미하며,  $i$ 아래 첨자는 각 원자에서의 내부 셀 전자수를,  $f$ 첨자는 최외각 셀의 자유 전자를 의미한다.

따라서 비탄성 산란이 일어나고 자유전자는 구별 불가능하므로 자유전자와의 산란 확률  $\sigma_{free}/\sigma_{inelastic}$  플라즈몬 진동에 의한 산란 확률  $\sigma_{plasmon}/\sigma_{inelastic}$ , 그리고 각 층에서의 총 내부 궤도 전자와의 산란 확률  $\sigma_{inner}/\sigma_{inelastic}$  을 구할 수 있다. 난수에 의해 각 층에서의 내부 궤도 전자와의 산란이 결정되면 다원자 층에서 구성 개별 원자와의 비탄성 산란을 결정할 수 있는 확률( $P_k$ )을 식 (19)와 같이 구할 수 있게 된다. 이렇게 한  $k$ 원자가 결정되면, 원자의 내부 번째 궤도의 전자와 충돌할 확률( $P_i^k$ )은 식 (20)처럼 구할 수 있으며 이를 이용하여 난수로 번째 내부 셀 전자와의 산란을 결정할 수 있다.

$$P_k = N_k \sum_i (Z_i^k \sigma_i^k) / \sigma_{inner} \quad (19)$$

$$P_i^k = Z_i^k \sigma_i^k / \sum_i (Z_i^k \sigma_i^k) \quad (20)$$

이렇게 각 층에서 특정 개별 원자의 비탄성 산란 내부 셸 전자 이온화(inner shell ionization)에 대한 전자 메커니즘이 결정되면 이전 산란 점에서부터 선택된 산란 비행 구간에 대해 특정 개별 단위자로만 구성된 구간으로 가정하여 불연속 에너지 손실을 계산한다면 이미 잘 알고 있는 각 원자에서의 결합 에너지  $U_i$  데이터 [11]를 화합물에 대하여도 변형 없이 그대로 사용할 수 있는 단위자 물질에서의 적용 모델[1]처럼 에너지 손실을 손쉽게 구할 수 있게 된다. 저 에너지 모델에서는 산란간 전자의 산란 길이가 매우 작으므로 화합물에 대하여 이렇게 가정하는 것은 타당할 것으로 여겨진다. 그러므로 유효 전자번호를 사용할 때의 내부 및 최외각 셸 재배치 및 이에 따른 결합 에너지의 결정이라는 문제를 손쉽게 해결할 수가 있다. 이러한 결과를 기존의 유효 전자번호를 사용한 모델과 비교하여 시뮬레이션 결과부에서 논의하였다.

또한, 단위자 층에서의 플라즈마 진동(자유전자 산란 및 플라즈몬 여기)에 따른 미분 산란 단면적 및 에너지 손실을 구하기 위한 단위자 층에서의 단위 체적당 자유전자의 총 개수( $n_e = [\text{자유전자수}/\text{cm}^3]$ )는 각 구성 개별원자의 자유전자의 총합으로서 아래 식 (21)와 같이 계산할 수 있다.

$$n_e = \sum_k (N_k Z_k^+) \quad (21)$$

효율적인 계산을 위하여, 산란 궤적을 구하기 전에 각 층에서의 최소 미소 증분 에너지(초기 입사 에너지의 1/10,000)에서부터 주입되는 전자의 초기 입사 에너지까지 미소증분 에너지만큼 증가해 가면서 탄성 및 비탄성 산란 단면적, 산란 메커니즘을 결정하는 확률, 각 층에서의 메커니즘에 따른 에너지 손실을 미리 계산하여 산란 궤적을 구하는 반복 루프 계산 과정에서는 그대로 불러 사용하도록 알고리즘을 적용하였다. 1차 및 2차 생성 전자는 모두 동일하게 탄성과 비탄성

산란을 고려한 복합(Hybrid) 모델을 적용하였으며, 산란 궤적 계산은 표면을 벗어나거나 20 eV 이하로 떨어지면 중단하였다. 또한, 전자의 산란 궤적이 층을 바꾸어 산란하는 경우에는 각 층 간의 에너지 손실률이 다르므로 이것을 보정해 주어야 한다. 참고 문헌 [6]의 계산 모델링을 사용하여 층간 산란 궤적을 고려하여 계산하였다.

2.5. 가우시안 빔 픽셀 및 노광/현상 공정 시뮬레이션

전자빔 노광 공정을 모델링하기 위해 우선 위에서 언급한 다층 단위자 층에서의 전자 산란에 대한 몬테카를로 시뮬레이션을 수행하여 리지스트 층에 전이된 포인트-응답(point-response) 에너지 분포를 구한 후 그림 4와 같은 가우시안 빔 형태의 전자빔 픽셀 분포를 고려하여 가우시안(Gaussian) 빔 컨벌루션(convolution)[4]을 사용하여 가우시안 빔 노광 단위 픽셀 분포를 구하였다.

가우시안 빔 형태의 하나의 노광 단위 픽셀 분포를 구한 다음 단일 라인 패턴에 대해 그림 5와 같은 단위 픽셀 스텝(step) 공정 알고리즘을 통해 단위 픽셀 분포를 스텝핑(steping)하면서 중첩하여 전자빔 노광(exposure) 공정에서의 총 에너지 전이 분포를 구하면 그림 6과 같이 총 노광 에너지 분포로 나타낼 수 있다. 이러한 노광 에너지 분포에 대해 리지스트 층에서 현상액의 현상율(현상길이/단위시간)에 따라 스트링(string) 모델[4]을 이용하면 현상(development) 시뮬레이션을 수행하면 현상한 후의 단일 라인(그림 6에서 Cut Line의 단면적)에서의 2차원 형상 결과를 SEM 측정형상과 비교할 수 있다.

또한, 실 공정과 같이 1차 노광 후 1차 현상, 2차 노광 후 2차 현상을 수행할 수 있도록 시뮬레이터를 구성하였다. 현상 시뮬레이션에서는 각기 다른 현상율을 갖는 현상액에 대해 SEM 실험 데이터를 사용하여 결정된 현상율을 결정할 수가 있으며, 현상 시뮬레이션

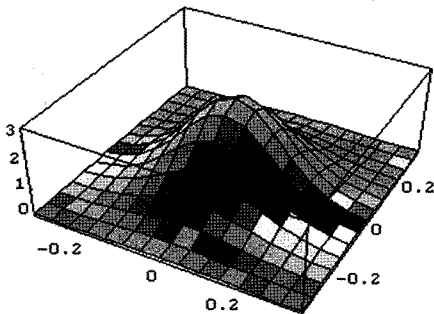


그림 4. 단위 가우시안 빔(픽셀) 형상

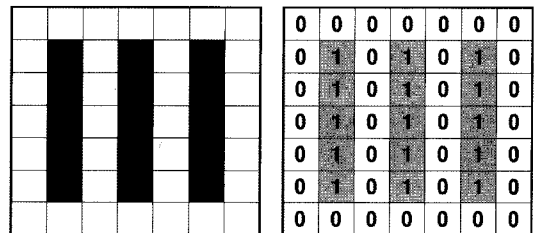


그림 5. 간단한 라인 패턴에 따른 픽셀 스텝(step)공정 알고리즘(여기서 '1'은 노광을, '0'은 노광되지 않은 픽셀을 의미)

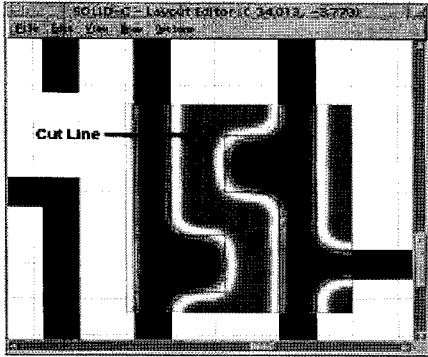


그림 6. 단위 노광 픽셀 중첩에 의한 전체 패턴에서의 중첩 노광 분포

모델로는 스트링(string) 알고리즘을 사용하였다.

### 2.6. ZEP520 양성 포토리지스트 모델링

ZEP520을 모델링하기 위하여 그림 7에 보인 고분자 식 ( $C_{13}H_{16}O_2Cl$ )<sub>n</sub>을 사용하였으며, 밀도( $g/cm^3$ )는 1.2를 사용하였다. 위에서 언급한 가우시안 빔 노광 스텝 공정과 현상 시뮬레이션과 같이 시뮬레이션을 수행하였다. 현상액은 MIBK:IPA(1:3)을 사용하였으며, 이에 대한 현상율을 표현하는 식은 참고문헌[14]의 데이터 식을 사용하였으며 아래와 같다.

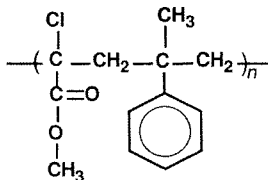


그림 7. ZEP520 고분자식

$$R(E) = 9.8e-4 \cdot (1+E/1.210)^{-1.9} [\text{\AA}/\text{sec}] \quad (22)$$

여기서, E는 단위체적당 리지스트에 전이된 에너지 [ $J/cm^3$ ]이며, 현상율  $R(E)$ 의 단위는 [ $\text{\AA}/\text{sec}$ ]이다

### 3. 시뮬레이션 결과 및 논의

효율적인 계산을 위하여, 산란 궤적을 구하기 전에 각 층에서의 미소 증분 에너지에 따라 주입되는 전자의 초기 입사 시뮬레이션 에너지에 대해 각 층에서의 탄성 및 비탄성 산란 단면적, 산란 메커니즘을 결정하는 확률, 각 산란 메커니즘에 따른 에너지 손실을 미리 계산하여 배열로 테이블화하여 저장하고 산란 궤적을

구하는 반복 루프 계산 과정에서는 전자의 에너지에 따라서 배열에 저장된 계산값을 그대로 읽어 사용하도록 알고리즘을 개발 적용하였다. 1차 및 2차 생성 전자는 모두 탄성과 비탄성 산란을 적용하였으며, 산란 궤적 계산은 표면을 벗어나거나 20 eV 이하로 떨어지면 중단하였다. 산란 궤적을 구하기 위한 반복 루프에 들어가기 전에 미리 파라미터들을 계산하기 위한 미소 에너지 증분은 초기입사에너지/10,000 [eV]로 설정하였으며, 위에서 언급된 탄성 및 비탄성 산란, 에너지 손실 등의 파라미터를 미리 계산하였다.

그림 7에 0.4  $\mu\text{m}$  두께의 ZEP520/GaAs 기판 구조에서 100개의 산란궤적에 대한 결과 그림을 보였으며, 검정색은 주입된 1차 전자에 대한 산란 궤적을, 빨간색은 1차 전자에 의해 생성된 2차 전자 생성에 의한 산란궤적을 나타낸다. 후방산란 효과 및 2차 생성 전자의 에너지 분산 효과를 시뮬레이션 결과가 보여 주고 있음을 확인할 수 있다.

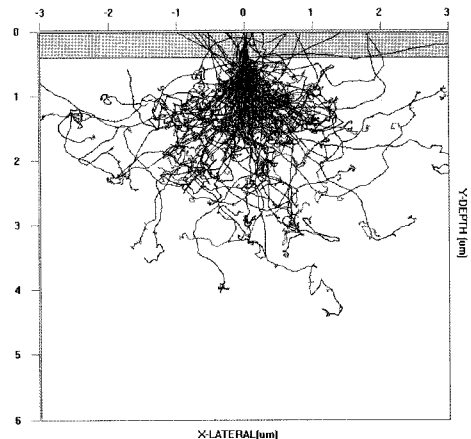


그림 7. 전자 에너지 50 keV로 0.4  $\mu\text{m}$ -ZEP520/GaAs 기판 구조의 (0, 0) 지점으로 수직 입사된 100개 전자의 산란궤적(검은 선은 1차 전자의 산란 궤적이며, 빨간 선은 2차 생성 전자의 산란 궤적을 나타냄)

그림 8에서는 에너지 50 keV에서 GaAs 기판 위에 동일한 0.40  $\mu\text{m}$  두께의 PMMA와 ZEP520이 도포된 타겟 구조에서의 전이 에너지 분포에 대한 시뮬레이션 결과를 비교하여 나타내었다. 비교 결과도를 보면 PMMA PR(photoresist) 층에 비해 ZEP520 PR층에서의 전이에너지 분포가 약간 더 높게 나타나고 있으나 그 차이가 크지 않음을 알 수 있었으며, 양쪽 경우 모두 GaAs 기판 경계에서 후방산란 효과로 인해 전이 에너지 분포가 크게 나타남을 알 수 있다.

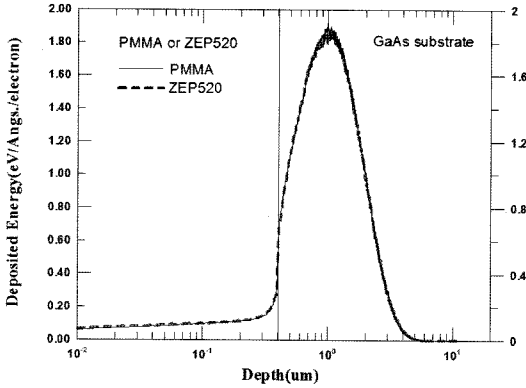


그림 8. 전자 에너지 50 keV에서 0.40  $\mu\text{m}$  두께의 PMMA/GaAs기판 구조(실선)와 동일 두께의 ZEP520/GaAs기판 구조(파선)에서의 단일 전자에 대한 전자 에너지 분포 비교

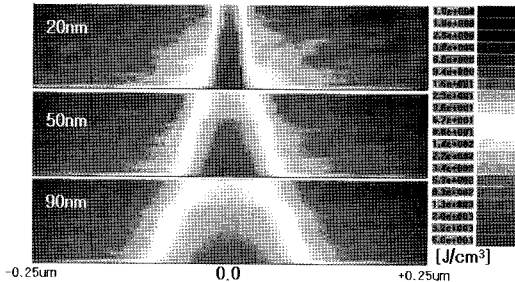
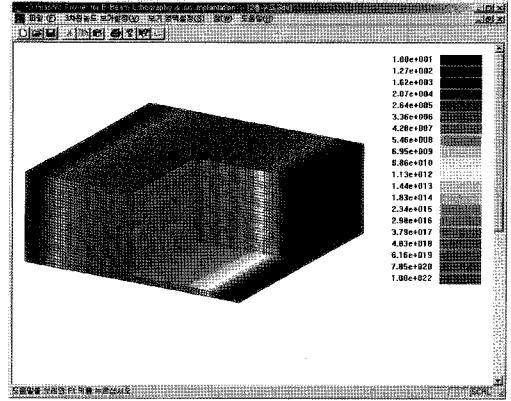


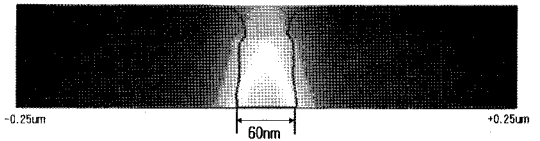
그림 9. Dose  $900 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ , 전자빔 에너지 50 keV, 0.1-ZEP520/GaAs 기판구조에서 2차원 노광 에너지 분포의 가우시안 빔 직경효과

그림 9에서는 나노 패턴 형성을 형성하기 위해서는 sub-100 nm 두께 이하의 ZEP520 PR층에서의 전자빔 직경 효과를 고려할 필요가 있는데, 이를 위해 전자빔 직경 20, 50 및 90에 대해 1픽셀 단일 라인에 대해 노광한 후 절단한 단면에서의 2차원 전이 에너지 분포 비교 결과이다. 전자빔 직경이 작을수록 패턴 전이 해상도가 높고 근접 효과(proximity effect)를 최소화할 수 있음을 보여주고 있다.

그림 10에서는 전자빔 에너지가 50 keV일 때 0.1-ZEP520/GaAs 기판 구조에서 가우시안 빔 직경 20, dose  $900 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ 으로 노광한 후 70초간 현상액 MIBK:IPA(1:3)에서 현상한 0.1  $\mu\text{m}$  두께의 ZEP520 양성 PR 현상에 대해 선폭 60 nm를 얻은 시뮬레이션 결과를 보였다. 이렇게 가우시안 전자빔 직경에 따라 PR층에 전이 흡수된 에너지 분포를 몬테 카를로 시뮬레이션을 통해 계산하여 구하고 현상액에 따른 현상 시뮬레이션



(a)



(b)

그림 10. 50 keV 노광 시스템에서 0.1-ZEP520/GaAs 기판 구조에서 (a) dose  $900 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ 에서의 3차원 노광분포 및 (b) 가우시안 빔 직경 20 nm의 단위 픽셀 라인의 2차원 단면적에 대해 현상 시뮬레이션한 현상 결과(현상액 MIBK:IPA(1:3)에서 70초 현상)

을 통해 최적의 현상 시간을 찾을 수 있다면 나노패턴 형성을 위한 리소그래피 공정 개발 시간을 단축시킬 수 있을 뿐만 아니라 근접 효과 및 후방산란 효과를 보정하여 리소그래피 공정 조건을 최적화할 수 있으리라 여겨진다.

#### 4. 결 론

본 논문에서는 다층 타겟 구조에서도 전자빔 리소그래피 공정 시뮬레이션을 수행할 수 있는 물리적 토대의 효율적인 전자빔 리소그래피 시뮬레이터를 개발하였고, 나노리소그래피 패턴 제작 및 분석을 위해 ZEP520 PR에 대하여 노광 및 현상 공정을 시뮬레이션하여 그 결과를 분석하였다. ZEP520 PR에서 빔 크기에 따른 노광 효과 및 후방 산란 효과를 시뮬레이션할 수 있음을 확인하였다. 개발된 전자빔 리소그래피 시뮬레이터는 사용자가 손쉽게 현상액에 따른 사용자의 실험 데이터를 이용해 현상율을 결정하고 직접 C++ 언어로 실행코드를 수정하지 않고 DLL로 작성하여 시뮬레이션에 적용하도록 구성하였다. 또한 노광 에너지,



빔 크기/픽셀 스텝의 크기, 리지스트 다층 구조 및 기판 등에 따른 리지스트 층들에 전이 흡수된 에너지 분포를 구하도록 하였다. 그리고 전자빔 리소그래피 공정에서의 최적 노광 및 현상 공정 조건을 찾고 전자빔 리소그래피 개발 공정 시간을 줄일 수 있을 것으로 기대된다. 전자빔 리소그래피 공정에 의한 패턴 제작 레이아웃 상의 패턴 현상 후의 에러 검출 및 보정 툴로서 사용될 수 있도록 향후에는 ZEP520 PR에 대해 현상 후의 SEM 측정 데이터와 비교하여 정확성을 확보할 예정이다.

## 감사의 글

본 연구는 2006년도 산학협동재단 학술연구비 지원 사업에 의해 수행되었습니다.

## 참고문헌

1. M. Kotera, "A Monte Carlo simulation of primary and secondary electron trajectories in a specimen," *J. Appl. Phys.*, vol. 65, no. 10, pp.3991-3998, 1989.
2. Kang-Yoon Lee, Guang-Sup Cho, and Duk-In Choi, "Monte Carlo simulation energy dissipation in electron beam lithography including secondary electron generation," *J. Appl. Phys.*, vol. 67, no. 12, pp.7560-7567, 1990.
3. D. C. Joy, *Monte Carlo Modeling for Electron Microscopy and Microanalysis*, Oxford university Press, 1995.
4. 서태원, *전자빔 리소그래피에서 스트링 모델을 이용한 3차원 리지스트 프로파일 시뮬레이션*, 서울대학교 석사학위 논문, 1995.
5. M. Yasuda, H. Kawata, and K. Murata, "Study of the spatial distribution of backscattered electrons from a gold target with a new Monte Carlo simulation," *J. Appl. Phys.*, vol. 77, no. 9, pp.4706-4713, 1995.
6. Y. M. Gueorguiev, D. I. Ibanov, and G. M. Mladenov, "A program for Monte Carlo simulation of penetration and scattering of accelerated electrons in multicomponent multilayer targets," *Vacuum*, vol. 47, no 10, pp.1227-1230, 1996.
7. Su-Hwan Kim, Young-Mog Ham, Wongyu Lee, and Kukjin Chun, "New Approach of Monte Carlo Simulation for Low-Energy Electron-Beam Lithography," *Microelectronic Engineering*, vol. 41/42, pp.179-182, 1998.
8. YoungJae Lee, *Modeling and simulation of charging effects in electron beam lithography*, Ph.D. thesis, Seoul National University, 2001.
9. X. Sun, Z. J. Ding, Q. R. Pu, H. M. Li, Z. Q. Wu, W. Q. Gu, K. W. Peng, G. J. Wu, F. A. Zhang, and N. K. Kang, "Monte Carlo simulation of electron transmission through the scattering masks with angular limitation for projection electron lithography," *J. Appl. Phys.*, vol. 92, no. 7, pp.3641-3646, 2002.
10. SIGMA-C사 <http://www.sigma-c.de/> 홈페이지 참조.
11. Electron shell binding energy data for each atom are taken from the web site <http://www.webelements.com/>.
12. R. Browning, T. Z. Li, B. Chui, Jun Ye, R. F. W. Pease, Z. Czyzewski, and D. C. Joy, "Empirical forms for the electron/atom elastic scattering cross sections from 0.1 to 30 keV," *J. Appl. Phys.*, vol. 76, no. 4, pp.2016-2022, 1994.
13. Kamil A. Valiev, *The Physics of Submicron Lithography*, Plenum Press, 1992.
14. 김진광, 김학, 한창호, 전국진, "나노구조형성을 위한 고에너지 전자빔 리소그래피 시뮬레이션-전자빔 리소그래피 시뮬레이터 개발", Tech. Dig. 2004 Asia-Pacific Workshop on Fundamentals and Application of Advanced Semiconductor Devices, Sasebo, Japan, June 30-July 2, 2004.