

Monte Carlo 법을 이용한 저압화학증착 공정에서의 미세박막 증착패턴에 관한 전산모사

윤 종 호(학), 박 상 규(정), 이 시 우(정)

포항공과대학 화학공학과 재료공정연구실 / 산업과학기술연구소

Monte Carlo Simulation of Thin Film Deposition in LPCVD Process

Jong-Ho Yun, Sang-Kyu Park, and S. Rhee

Laboratory for Advanced Materials Processing (LAMP)

Dept. of Chemical Engineering, POSTECH / RIST

1. 서론

1958년 J. Kilby에 의해 최초로 집적회로의 개념이 창출된 이후 집적회로 제조 기술은 급속히 발전하여 256 MDRAM / 1 GDRAM 개발을 위해 선진각국이 치열하게 경쟁하고 있다. 그러나 1 MDRAM 이상의 초고집적 회로의 제조시 가공선폴이 1마이크론 미만이 되고 3차원적 다층배선의 연결구멍이 사용되므로 보다 정밀한 공정기술과 새로운 재료개발이 필요한 실정이다. 특히 미세도랑이나 연결구멍에 박막을 증착시킬 경우 증덩힘이 불량하여 빈 공간인 key hole이 형성되면 후공정인 etch-back 공정에도 문제를 일으킬뿐 아니라 소자의 전기적 성능에도 치명적인 영향을 끼치게 된다.

따라서 본 연구에서는 Monte Carlo법을 이용하여 흡착, 재방출 및 표면확산을 고려한 모델을 개발하였으며 이러한 모델을 이용하여 미세박막 증착패턴에 관한 전산 모사를 수행하였다. 또한 실험결과와 전산 모사 결과를 비교 분석하여 공정변수에 따른 부착계수 변화를 살펴보았다.

2. 내용

본 연구실에서 수행한 저압화학증착에 의한 텅스텐 박막증착은 운송기체로 $Ar(H_2/He)$ 을 이용하였으며 반응기체인 WF_6 를 SiH_4 기체로 환원시키는 공정에 의하여 이

루어졌다. 실험이 끝난 시편은 단면을 절취하여 전자주사현미경(SEM) 촬영으로 구한 사진을 통하여 도랑에 인접한 표면과 도랑바닥에서의 증착된 박막두께를 구하였으며 그 비로 증덩힘을 계산하였다.

저압화학증착 공정은 보통 0.1~수 torr의 압력범위내에서 조업되는데 이때의 기체흐름은 기체-기체 충돌에 비해 기체-벽면 충돌이 지배적인 Knudsen 확산이나 자유분자확산(free molecular flow)에 의하여 이루어지며 이와 같은 기체운동을 모사하기 위하여 개개의 입자의 궤적을 추적하는 Monte Carlo법을 사용하였다. 또한 표면위에서의 반응입자의 운동은 조건에 따라 재방출되는 재방출 메카니즘과 표면위를 이동하는 표면확산으로 구성되어 각각의 효과를 살펴볼 수 있도록 하였다. 이러한 순서로 개개의 입자의 위치를 모두 파악한 후 2차 polynomial을 이용하여 데이터를 smoothing하고 string법을 이용하여 표면전진이 이루어지도록 하였다.

3. 결과 및 고찰

이론적인 연구에서는 부착계수, 증덩비, 표면확산에 따른 증덩힘을 구하였으며 부착계수와 증덩비가 작을수록, 표면확산이 증가할수록 증덩힘은 개선되었다. 또한 도랑의 구조적 형태가 미치는 영향을 분석하였는데 그 결과 도랑입구의 폭이 변

화하면서 도랑옆벽면의 기울기가 감소할 경우와 도랑 모서리 부분을 등글게 할 경우에 증착률은 개선되었으나 도랑 밑면길이를 감소시키면서 도랑옆벽면의 기울기가 감소할 경우에는 증착률은 오히려 악화되었다. 그리고 서로 다른 재방출 메커니즘을 조사한 결과 거울반사 재방출인 경우에 증착률이 가장 좋은 것으로 나타났다(그림 1 참조).

텅스텐 저압화학증착에 의하여 구한 SEM사진의 증착패턴과 전산모사 결과는 잘 일치하였으며(그림 2 참조) 온도에 따른 전산모사 결과 온도가 올라갈수록 부착계수가 증가하여 증착률이 악화되었으며 표면에서의 증착속도는 증가하였다. 부착계수와 표면증착속도의 활성화에너지는 각각 13.0, 6.4 kcal/mol로 밝혀졌다(그림 3 참조). 운송기체를 변화하면서 저압화학증착 실험을 수행한 결과 Ar, H₂, He순으로 증착률이 나빠졌으며 부착계수는 0.04, 0.1, 0.29로 나타났다(그림 4 참조).

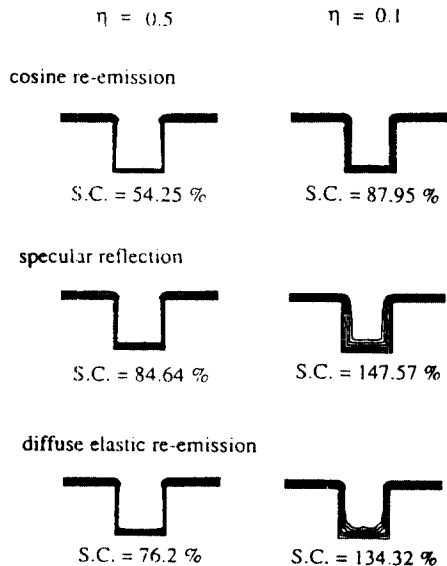


그림 1. 증착비 1인 도랑에 대한 서로 다른 재방출메커니즘에 따른 증착률.

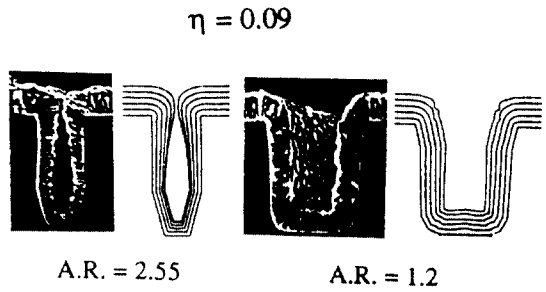


그림 2. 실험결과와 전산모사 결과와의 비교.

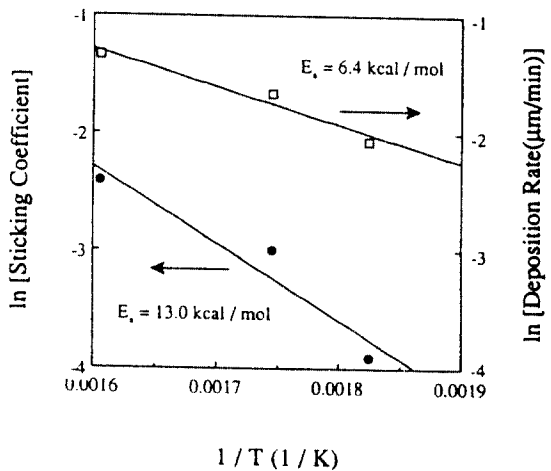


그림 3. 부착계수와 표면증착속도에 대한 Arrhenius plot.

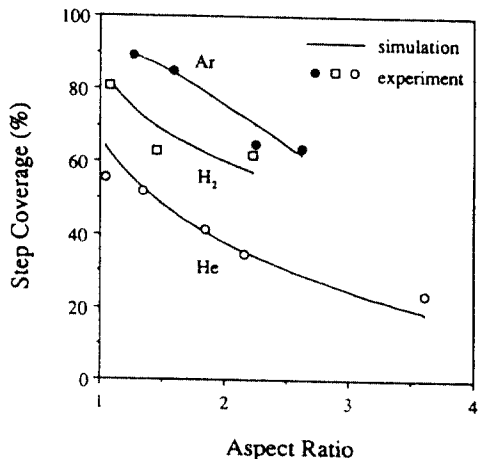


그림 4. 운송기체의 종류에 따른 실험 및 전산모사 결과.