

열 산화막 성장의 스트레스 의존성에 관한 연구

Stress Effect of Thermal Oxidation

윤상호*, 이재희, 원태영

인하대학교 공과대학 전자재료공학과 반도체 및 박막 기술 연구소

Tel: 032-860-7436, Fax: 032-862-1350, E-mail: ysh@hse1.emde.inha.ac.kr

Sangho Yoon, Jaehee Lee, Taeyoung Won

Inha Research Institute of Semiconductor and Thin Film Technology,
Dept. of Electronic Materials and Devices Engineering, Inha University

요약

In this paper, the three-dimensional stress effect of thermal oxide is simulated. We developed the three-dimensional finite element numerical simulator including three-dimensional adaptive mesh generator that is able to refine and eliminate nearby moving boundary of oxide, and oxidation solver with stress model. The main effect of deformation at the coner area of oxide is due to distribution of oxidant, but the deformation of oxide is affected by the stress in the oxide. In the island structure which is the structure mostly covered with nitride and a coner is opened to oxidation, oxidation is reduced at the coner by compressive stress. In the hole structure which is the structure mostly opened to oxide and a coner is covered with nitride, however, oxidation is increased at the coner by tensile stress.

I. 서론

차세대의 반도체 제조 기술은 최소 선폭 0.1 μ m급의 가공 기술이 요구되므로, 고도의 반도체 장비 제조 기술 및 TCAD(Technology Computer-Aided Design) 기술이 요구되고 있다. 반도체 제조 공정을 개발하기 위해서는 막대한 연구 시간과 연구비가 소모되므로, 시장에 대한 시간성(time-to-market)을 단축시키고 각 공정 및 소자의 특성에 대한 민감도(sensitivity) 분석과, 측정할 수 없는 물리적 메카니즘에 대한 이해와

분석, 소자의 구조적 형상과 물리적 현상의 시각적 파악 및 분석을 위하여는 실제의 실험에 앞서서, 컴퓨터를 이용한 모의 실험 단계, 즉 TCAD를 사용한 시뮬레이션이 개발 준비비용의 효율성을 증대시킨다는 면에서 필수적이다[1].

본 논문에서는 차세대 반도체 메모리 제조 기술 중 핵심 기술에 해당하는 열산화 기술로 제작하는 LOCOS의 미세 3차원 형상을 컴퓨터 모의 실험을 통하여 예측할 수 있도록 유한요소법을 적용한 수치 해석기를 개발하였다. 또한, 산화막이 성장하면서 스트레스가 발생하고, 이에 따라 산화막의 형태가 변화하므로, 산화 공정 시뮬레이션을 위해서는 스트레스 효과가 반드시 고려되어야 한다. 따라서, 본 연구에서는 이동하는 3차원 경계면에서의 노드 생성 및 제거 기능을 지닌 3차원 적응 메쉬 생성기를 개발하였고, 스트레스 모델을 첨가한 지배 방정식을 유한요소법으로 이산화시켜 수치 해석적으로 해를 구하는 3차원 산화 시뮬레이터를 개발하였다.

II. 3차원 산화 수치해석기

본 논문에서는 3차원 산화 공정 시뮬레이션을 위하여 유한요소법을 사용하여 산화막 성장에 대한 확산 방정식과 유동방정식을 해석하였다. 산화막의 성장에 따라서 경계면이 이동하게 되고, 계산의 오차를 줄이고, 해의 수렴 속도 증가시키기 위해서 산화막 내부에 새로운 노드들을 생성해야 하므로, 효과적인 3차원 적응 메쉬 생성기의 개발이 필수적이라 할 수 있다[2].

본 연구에서 제작한 3차원 적층 메쉬 생성기는 생성된 초기 메쉬 구조로부터 시뮬레이션을 수행하는 동안 이동하는 실리콘/산화막 계면에 인접한 영역에 대하여 프리즘 형태의 구조를 정의하고, 정의된 프리즘을 기초로 하여 메쉬의 정련화 과정을 수행한다. 이러한 적층 메쉬 생성기의 결과를 2차원으로 그림1에 도시하였다.

산화막의 형성은 산화막을 통하여 실리콘 영역으로 확산해 가는 산화제의 확산 과정과 실리콘 영역으로 확산된 산화제와 실리콘의 반응에 의한 산화막 형성의 두 가지 과정으로 구성되어 있다. 산화제의 확산은 노출된 영역에서 산화제가 산화막을 통해 실리콘 계면으로 확산된다. 질화막으로 덮여 있는 영역은 산화제의 확산이 일어나지 않는 영역이 된다. 노출 영역에서는 질량 전달 계수에 의존하여 산화제의 농도가 결정되며, 실리콘 경계에서는 반응 계수에 의존하여 산화막의 성장률이 얻어진다[3]. 확산 방정식과 유동 방정식은 먼저 유한요소법을 위한 약정식(weak form)으로 구성하여야 하며, 3차원 형상 함수(shape function)를 결정하고, 구성된 약정식 형태의 지배 방정식은 각 요소 구간에서 계산하기 위하여 형상 함수와 결합되어 이산화된다. 각 요소에 대한 계산을 수행한 후, 최종적으로 각 요소에서 계산된 결과를 전체 행렬(global matrix)로 결합하여 계산 결과를 구한다[4][5]. 확산 방정식과 유동 방정식을 계산한 3차원 시뮬레이션 결과를 그림 2에 도시하였다.

III. 산화막의 스트레스 의존성

산화막의 성장시 산화막은 비압축 점성 유체 특성을 지니며, 스트레스에 의하여 그 형태가 변화된다. 따라서, 각 시간 간격마다 확산 방정식과 유동 방정식을 계산할 때 스트레스에 의존하는 계수의 값을 보정하여야 한다. 즉, 산화제가 산화막을 통과하여 실리콘 계면으로 확산될 때 확산 계수는 산화막의 압력에 지수적으로 비례하며, 실리콘 경계에서 산화 메카니즘 계수인 산화 반응 계수는 스트레스에 지수적으로 비례하는 특성을 보인다. 산화막의 점성 계수는 전단 응력에 의존하는 특성을 보인다[6][7].

본 연구에서 수행한 산화 조건으로 <100>방향의 실리콘 기판에 대하여, 1,000℃, 60분간, 습식 산화 조건으로 설정하였으며, 초기 산화막의 두께는 300 Å, 질화막의 두께는 2,000 Å으로 가정하였다. 질화막의 두께가 두꺼워져서 질화막의 압력이 커진 경우, 산화

제의 확산이 질화막의 아래 부분에서 감소되므로 그림 3에 나타난 바와 같이, 질화막 마스크가 두꺼울 때 LOCOS 형태의 변형이 심하게 발생하고, 산화제의 확산도 더 작게 이루어짐을 볼 수 있었다. 이 때 성장한 산화막의 두께는 2,250 Å으로 두 조건 모두 동일하였으나, 새부리의 길이는 각각 2,010 Å과 1,640 Å으로 질화막이 두꺼울 때 새부리의 길이가 감소함을 확인할 수 있었다. 또한, 섬구조의 코너 부근에서는 산화제가 다른영역에 비해 더 적게 확산되므로 새부리의 길이도 그 만큼 감소하게 된다. 질화막의 영향이 없을 때에는 기본 새부리 길이에 비해 65%의 새부리 길이를 가져서, 2,010 Å의 65%인 1300 Å의 새부리 길이를 가지며, 질화막이 두꺼운 경우 45%, 즉 738 Å의 새부리 길이를 가짐을 확인하였다.

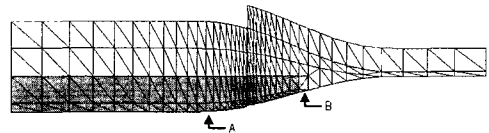


그림 1 3차원 메쉬 정련화 과정에 대한 단면도

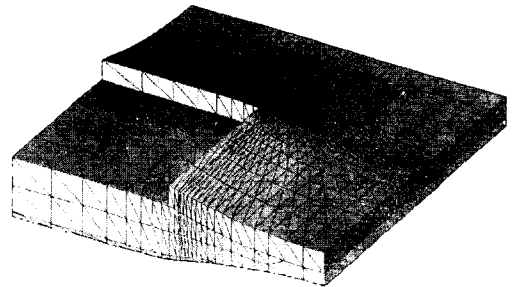


그림 2 섬구조의 산화막 성장 3차원 시뮬레이션 결과

스트레스를 관찰하기 위해 1000℃, WET 상태에서 60분 동안 산화막을 성장시켰다. 그림 4는 섬구조에서의 스트레스 분포로서 산화막을 제거하고 실리콘만을 도시한 그림과, 위에서 내려다 본 그림을 함께 도시하였다. 그림 4(a),(b)에 나타난 바와 같이, 마스크 아래 영역에서는 tensile 스트레스가 발생하고 field 영역에서는 compressive 스트레스가 발생한 것을 볼 수 있다. 여기서 compressive 스트레스를 양의 부호로 표시하였다. 산화 반응 계수, K_s 는 $K_0 \exp(-\sigma_m V_k / kT)$ 로 표현되므로, compressive 스트레스는 반응 계수를

감소시키게 된다. 특히 코너 부근에서는 compressive 스트레스가 매우 커짐을 확인할 수 있었다. 따라서, 새부리의 길이를 더욱 감소시키고, 산화막의 형태를 더욱 둥글게 만드는 효과를 가져온다. 앞서 설명한 스트레스 효과의 결과로서, 섬구조 산화막의 두께 분포를 그림 4(c)에 도시하였다. 코너에서 산화막이 둥글게 되는 효과는, 물론 앞서 설명한 산화제의 확산이 다른 영역에 비해 감소하는 영향이 주된 이유이지만 스트레스에 의해 그 영향이 더 커질 수 있다. 1000°C에서 WET 상태로 60분 동안 산화막을 성장시켰을 때, 3,800 Å 두께로 산화막이 성장되었고, 이때 사용한 노드는 5,445개, 사면체는 24,576개이며, 전체 사용된 데이터 메모리는 12Mbyte이다. 본 연구에서 시뮬레이션 한 결과, 질화막의 두께가 얇을 때에는 코너링 효과가 산화제의 확산이 주된 영향으로 나타났으며, 질화막의 두께가 1000 Å 이상인 경우 질화막에 의한 스트레스가 계면 스트레스에 영향을 주어 코너링 효과에 큰 영향을 미침을 확인하였다.

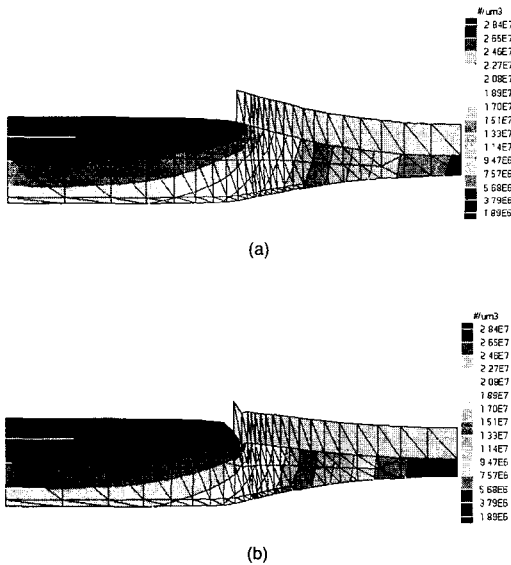


그림 3 3차원 산화 시뮬레이션 결과에 대한 단면 구조: (a) 질화막 마스크의 영향을 고려하지 않은 시뮬레이션 결과 (b) 질화막 마스크의 압력을 고려한 시뮬레이션 결과

그림 5에 도시한 바와 같이 공구조를 살펴보면, 코너 부근에서 다른 영역에 비해 더 많은 산화제의 확산이 이루어진다. 그러므로 새부리의 길이도 다른 곳에 비해 더 길어지며, 코너 부근에서 질화막 아래에서 발생하는 매우 큰 tensile 스트레스로 인해 산화 반응

계수는 더욱 커져서 코너에서 산화가 더욱 가속화되고, 이로 인하여 다른 영역에서 compressive 스트레스가 커지게 된다. 스트레스 효과의 결과로서, 공구조 산화막의 두께 분포를 그림 5(c)에 도시하였다. 양쪽 모서리에서는 compressive 스트레스의 영향으로 새부리의 길이가 감소하게 되며, 코너 부근에서는 tensile 스트레스가 커져서 새부리의 길이가 더욱 커지게 됨을 확인하였다.

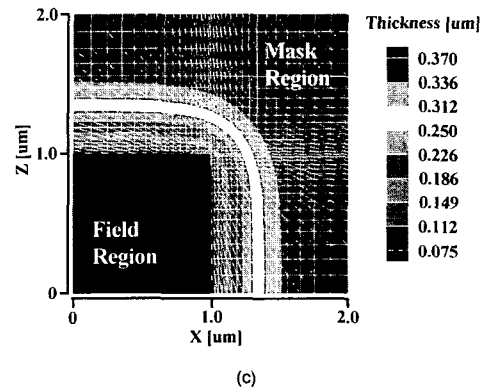
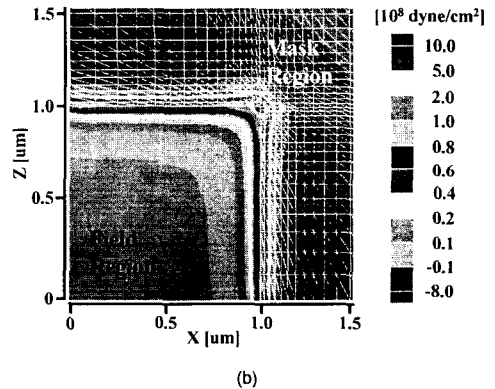
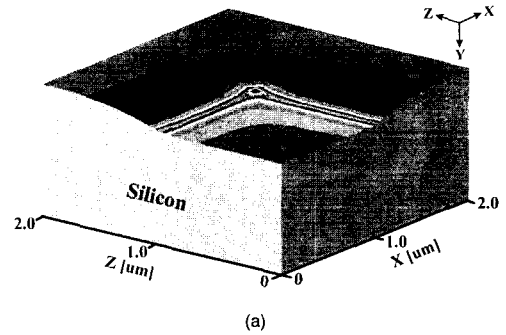
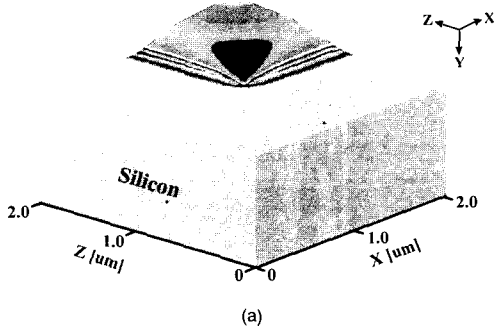
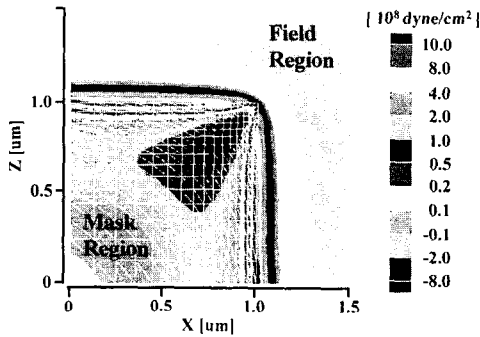


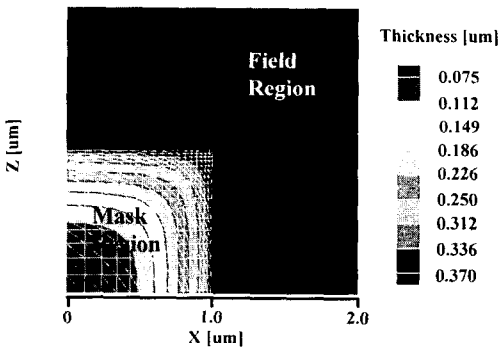
그림 4 섬구조에서의 스트레스 분포: (a) 산화막/실리콘 계면에서의 스트레스 분포 (b) 위에서 내려다 본 스트레스 분포 (c) 산화막의 두께 분포



(a)



(b)



(c)

그림 5 공구조에서의 스트레스 분포: (a) 산화막/실리콘 계면에서의 스트레스 분포 (b) 위에서 내려다 본 스트레스 분포 (c) 산화막의 두께 분포

IV. 결론

본 연구에서는 이동하는 3차원 경계면에서의 노드 생성 및 제거 기능을 지닌 3차원 적응 메쉬 생성기를 개발하였고, 지배 방정식을 유한요소법으로 이산화시켜 수치 해석적으로 해를 구하는 스트레스 효과를 고려한 3차원 산화 시뮬레이터를 개발하였다.

시뮬레이션 결과 섬구조의 코너 부근에서는 질화막의 영향이 없을 때에는 기본 새부리 길이에 비해 65%의 새부리 길이를 가지고, 질화막이 두꺼운 경우 45% 새부리 길이를 가짐을 확인하였다. 코너에서 산화막이 둥글게 되는 효과는, 마스크 형태에 따라 산화제의 확산이 다른 영역에 비해 감소하거나 증가하는 영향이 주된 이유이지만 스트레스에 의해 그 영향이 더 커짐을 확인하였다. 섬구조에서는 compressive 스트레스에 의해 코너 부근에서 산화가 감소하는 결과를 가져오고, 공구조에서는 tensile 스트레스로 인해 산화가 더 증가하는 결과를 보임을 확인하였다.

본 과제는 차세대 반도체 기반기술 개발사업, 시스템공학 연구소의 CRAY R&D 사업, 정보통신연구 관리단의 대학기초연구 지원사업, 한국과학재단의 산학협동연구 사업 94-08-00-01-2의 지원으로 수행되었다.

V. 참고문헌

- [1] H. Umimoto, et. al., IEEE Trans. on Electron Devices, Vol. ED-38, No. 3, pp. 505-511, 1991.
- [2] S. Bozek, et. al., SISDEP, Vol. 6, pp. 460-463, 1995.
- [3] A. Poncet, IEEE Trans. Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems, Vol. 4, No. 1, pp.41-53, 1985.
- [4] K.H. Huebner, *The Finite Element Method for Engineers*, 3rd ed., Wiley, 1995.
- [5] O.C. Zienkiewicz and R.L. Taylor, *The Finite Element Method*, 4th ed., Vol. 1, McGraw-Hill, 1989.
- [6] H. Umimoto, et. al., IEEE Electron Devices Letters, Vol. 10, No. 7, pp. 330-332, 1989.
- [7] P. Sutardja, et. al., IEEE Trans. on Electron Devices, Vol. ED-36, No. 11, pp. 2415-2421, 1989.
- [8] S.H. Yoon, J.H. Lee, T.Y. Won, B.J. Cho, J.C. Kim, and D.H. Lee, "3-D Adaptive Simulation of Thermal Oxidation Process," Proceedings of the 26th ESSDERC, pp.351-354, 1996.