

論文95-32A-8-13

# 1 Giga급 집적회로 구현을 위한 3차원 산화 공정 시뮬레이터 개발 및 산화층 성장 특성 분석에 관한 연구

## (Development of Three-Dimensional Thermal Oxidation Process Simulator and Analysis the Characteristics of Multi-Dimensional Oxide Growth)

李俊賀\*, 黃好正\*

(Jun-ha Lee, and Ho-jung Hwang)

### 요 약

초고집적 회로에서의 단위 소자의 격리구조로 쓰이는 열산화 공정에 대한 다차원적인 산화막 성장을 모의 실험할 수 있는 3차원 산화공정 시뮬레이터를 개발하였다. 본 시뮬레이터는 빠른 시간 안에 결과를 얻을 수 있는 해석모델을 이용한 해석모델 시뮬레이터 모듈과 정확한 형상의 결과를 얻을 수 있는 수치모델을 사용한 수치모델 시뮬레이터 모듈로 구성되어 있다. 본 연구로 개발한 3차원 산화공정 시뮬레이터를 사용하여 다차원적인 마스크 형태에서의 시뮬레이션 결과 분석으로, 공구조의 모서리 영역에서는 산화층의 성장이 감소하고, 섬 구조에서는 마스크 모서리 부분이 직선적인 마스크 영역보다 산화층의 성장이 확대됨을 알 수 있었다. 이는 각 마스크의 구조에 따라서 산화층의 확산이 감소, 확대되는 것과 마스크의 압력이 각 영역에 따라 다르게 분포한다는 것으로부터 이해될 수 있다. 또한 전형적인 LOCOS구조뿐만 아니라 극소 구조의 공정 효과를 예측함으로써 본 연구로 개발한 시뮬레이터의 효용성을 확인하였다.

### Abstract

Three-dimensional simulator for thermal oxidation process is developed. The simulator is consisted by two individual module, one is analytic-model module and the other is numerical-model module. The analytic-model which uses simple complementary-error function guarantees fast calculation in prediction of multi-dimensional oxidation process. The numerical-model which is based on boundary element method (BEM), has a good accuracy and suitable for various process conditions. The results of this study show that oxide growth is retarded at the corner of hole structure and enhanced at the corner of island structure. These effects are reason of different distribution of oxidant diffusion and mask stress. The utility of models and simulator developed in this study is demonstrated by using it to predict not only traditional shape of LOCOS but also process effects in small geometry.

### I. 서론

\* 正會員 中央大學校 電子工學科

(Dept. of Electronic Eng. Chung-Ang Univ.)

※ 본 연구는 학술진흥재단 자유공모과제 "1 Giga급 집적회로 구현을 위한 실리콘 열산화공정에 대한 3차원 특성분석에 관한 연구"의 일환으로 수행되었음.

接受日字: 1994年10月14日, 수정완료일: 1995年7月29日

집적회로의 개발에 따라 소자간 전기적 절연을 위하여 다양한 형태의 격리구조가 이용되어왔다. 최초의 절연구조는 bipolar IC에 적용된 접합격리구조(Junction Isolation) 기술이며 이후 기판의 비활성 영역에 반퇴조적인 산화막인 LOCOS (LOCAL Oxidation

of Silicon) 격리구조가 NMOS, PMOS IC에서의 전기적 격리를 위한 중요한 기술로 개발되었다. 이 구조는 bipolar, CMOS등 대부분의 집적회로에서의 격리구조로 자리잡고있다.<sup>[1][2]</sup> 그러나 submicron 소자영역에서 LOCOS는 질화막하부의 “새부리영역(Bird’s Beak Region:BBR)”이라 불리는 측면산화영역이 증대하여 집적도 증가에 장애가 된다. 특히, 1/4  $\mu\text{m}$ 이하의 미세 공정에서는 산화공정의 마스크의존성이 더욱 증대하고 BBR의 3차원적 확장은 활성영역에 비하여 상대적으로 매우 증대하게된다. 또한 응력분포도 2차원적인 구조에서와는 매우 다른 형태와 크기로 분포하게될 것으로 예상되며 이와 같은 3차원적인 구조적, 물리적 특성들이 1 Giga급 회로 소자에서의 전기적 특성을 크게 좌우할 것으로 판단된다.<sup>[3][4]</sup> 이는 윈도우의 영향이 3 차원적으로 확장되는 추세이기 때문에 기존의 2차원적 산화특성과 물리가 전면적으로 재고되어야할 시점에 이미 도달하였기 때문이다.<sup>[5]</sup> 결국 신 기술개발은 실리콘 열산화의 3차원적 특성분석이 선결되지 않고서는 불가능하다는 것을 의미한다고 할 수 있다. 이와 같은 요구에 부응하기 위하여 본 연구에서는 LOCOS 구조에 대한 3차원적 실리콘 열산화특성을 분석하고 이를 토대로 하여 차세대 격리구조개발을 위한 기초를 마련하고자한다. 특성 분석을 위하여 3차원 실리콘열산화에 대한 해석적 모델과 수치적 모델이 구축되며 해석모델은 Complementary-error 함수를 이용한 수식으로, 수치적 모델은 BEM(Boundary Element Method)의 수치적 방법으로 구현되었다. 개발된 tool은 다양한 3차원적 구조 및 공정 조건의 산화막 특성 분석에 사용되었다.

II장에서는 해석모델과 수치모델의 방정식과 계수 및 수치방법인 BEM에 대해 설명한다. III장에서는 본 시뮬레이션을 통한 결과 및 결과의 분석과 다차원 효과에 대해서 설명하고, 또한 실험치와의 비교를 보인다. IV장에서는 결론을 맺는다.

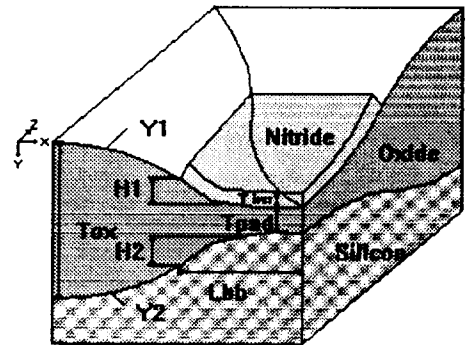
## II. 본 론

실리콘 열산화의 다차원적 분석을 위하여 필요한 전제로서 실리콘과 산소와의 다차원적(2,3차원) 반응 메커니즘이 이해 되어야하고, 산화공정조건(기판의 특성, 산화 시간, 압력, 온도등)이 그 메커니즘에 미치는 영향이 고려되어야한다. 또한 실리콘 열산화가 마스크의

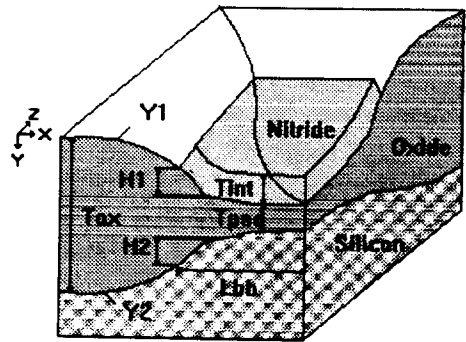
구조에 의존적인 특징을 나타낸다는 것을 감안한다면 마스크 구조에 따른 3차원적 산화 특성변화가 연구되어야할 것이다. 이를 위하여 본 연구에서는 해석적인 모델을 이용한 산화층의 형상을 계산하는 해석함수 모델과, 다차원적인 산화 메커니즘을 수학적 방법에 의하여 모델화하며 그 모델을 마스크 구조정보, 공정조건에 관한 정보등의 함수에 따라 정량화된 값으로 변환하는 수치적모델 모델을 구축하여, 산화층 성장의 최종적인 특성분석에 이용한다.

본 장에서는 3차원 해석 모델에서의 형상함수식 및 각 형상함수에 대한 계수식에 대해 설명한다. 또한 수치적 모델에서 확산방정식의 경계요소법을 통한 수치적인 풀이 및 산화층 성장 방정식의 유도에 대해 설명한다.

### 1. 3차원 LOCOS 형상에측을 위한 해석모델 모델



(a) 마스크 두께가 얇은 경우



(b) 마스크 두께가 두꺼운 경우

그림 1. 해석함수를 이용한 3차원 산화층 형상의 함수 및 계수

Fig. 1. The shape functions and parameters of three-dimensional oxide layer.

그림 1에서 비교적 마스크의 두께가 얇은 경우의 (a) 형상은 식 (1),(2)의 Y1과 Y2곡선으로 표면과 경계에서의 형상을 정의하며, (b)와 같은 마스크가 두꺼운 경우에는 산화층 표면 형상과 경계층 형상을 각각 두개의 곡선을 결합시킨 식(3)에서 식(6)으로써 표현한다. 마스크 두께에 대한 두 가지 형상의 선택은 그림 2.에서처럼 초기산화층과 마스크 두께의 비율로 결정되는 영역 1과 영역 2의 관계로 결정한다.<sup>16)</sup>

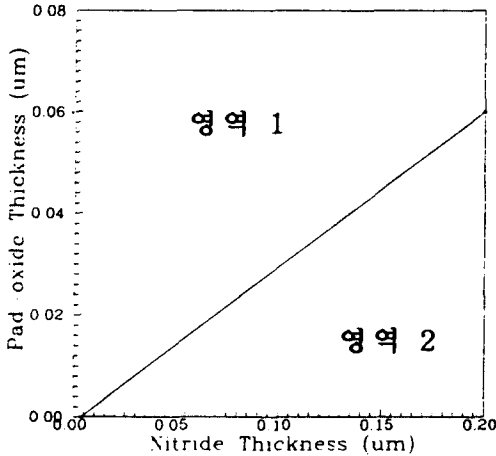


그림 2. 초기산화층과 마스크 두께의 비에 대한 새부리영역의 형상구분.

Fig. 2. Classification of the bird's beak shapes by thickness ration.

$$Y_1(x, z) = a_1(\operatorname{erfc}(b_1x + c_1) + \operatorname{erfc}(b_1'z + c_1')) + d_1 \quad (1)$$

$$Y_2(x, z) = a_2(\operatorname{erfc}(b_2x + c_2) + \operatorname{erfc}(b_2'z + c_2')) + d_2 \quad (2)$$

$$Y_1(x, z) = k_1(\operatorname{erfc}(l_1(x - \delta)) + \operatorname{erfc}(l_1'(z - a))) \quad \text{for } x, z \leq \delta \quad (3)$$

$$Y_1(x, z) = m_1 \left( \frac{(n_1 - x)}{(n_1 - x - q)} + \frac{(n_1' - z)}{(n_1' - z - q)} \right) \quad \text{for } x, z \leq \delta \quad (4)$$

$$Y_2(x, z) = k_2(\operatorname{erfc}(l_2x) + \operatorname{erfc}(l_2'z - e_{ox})) \quad \text{for } x, z \geq 0 \quad (5)$$

$$Y_2(x, z) = m_2 \left( \frac{(n_2 - x)}{(n_2 - x - q)} + \frac{(n_2' - z)}{(n_2' - z - q)} \right) \quad \text{for } x, z \leq 0 \quad (6)$$

식(1)에서 식(6)까지의 수식에 쓰인 파라미터들은 초기 산화층의 두께(Tpad) 및 초기 마스크의 두께(Tnit), 총 성장 산화막의 두께(Tox), 산화중 실리콘 소모 비율(m), 새부리 영역의 길이(질화막 하부에서의 측면산화길이, Lbb), 산화중 들려진 질화막의 높이(H)등의 식으로 부터 구해진다.

$$a_1 = \frac{m}{4} T_{ox} \quad (7)$$

$$b_1 = -c_1 + \frac{\sqrt{-\log(0.1) + c_1^2}}{L_{bb}} \quad (8)$$

$$c_1 = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left[ 1 - \frac{Hl(x)}{a_1} \right] \quad (9)$$

$$d_1 = 0 \quad (10)$$

$$b_1' = -c_1' + \frac{\sqrt{-\log(0.1) + c_1'^2}}{L_{bb}} \quad (11)$$

$$c_1' = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left[ 1 - \frac{Hl(z)}{a_1} \right] \quad (12)$$

$$a_2 = \frac{(m-1)E_{ox} + T_{pad}}{4} \quad (13)$$

$$b_2 = -c_2 + \frac{\sqrt{-\log(0.1) + c_2^2}}{L_{bb}} \quad (14)$$

$$c_2 = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left[ 1 - \frac{Hl_2(z)}{a_2} \right] \quad (15)$$

$$d_2 = -T_{pad} \quad (16)$$

$$b_2' = -c_2' + \frac{\sqrt{-\log(0.1) + c_2'^2}}{L_{bb}} \quad (17)$$

$$c_2' = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left[ 1 - \frac{Hl_2(z)}{a_2} \right] \quad (18)$$

$$k_1 = \frac{Hl}{2} \quad (19)$$

$$l_1 = l_1' = \frac{\sqrt{E}}{L_{bb}} \quad (20)$$

$$m_1 = \frac{mE_{ox}}{2} \quad (21)$$

$$n_1 = n_1' = \delta - \frac{Hlq}{Hl - m_1} \quad (22)$$

$$k_2 = -\frac{H}{2} \quad (23)$$

$$l_2 = l_2' = \frac{\sqrt{E}}{L_{bb}} \quad (24)$$

$$m_2 = -\frac{(m-1)E_{ox}}{2} \quad (25)$$

$$n_2 = n_2' = \delta - \frac{Hl_2q}{Hl_2 - m_2} \quad (26)$$

$$\delta = 0.025, \quad q = 0.015$$

새부리영역의 길이 Lbb와 질화막 들림높이 Hl은 다음 식으로 주어진다.

$$Lbb = Kl \left[ (-Temp + 1580.3) Tox^{0.67} \cdot \exp\left(-\left(\frac{Tnit - 0.08}{0.06}\right)^2\right) Tox^{0.3} \right] \quad (27)$$

$$Hl = Kh(-1.75 Tnit + 0.555) Tox \exp\left(-\frac{Temp}{200}\right) Er \quad (28)$$

$$Hl_2 = Kh(-1.75 Tnit + 0.445) Tox \exp\left(-\frac{Temp}{200}\right) Er \quad (29)$$

여기서 Temp 는 산화온도(°K)이고 파라미터 kl = 8.2510<sup>-3</sup>, Kh = 402 이다.

마스크 모서리 쪽에서는 산화촉확산 제한 (공구조) 및 증배 (섬구조) 현상과 질화막 압력증가 (공구조), 감소(섬구조) 현상에 의한 두께 변화를 고려해야 한다. 이러한 현상은 질화막 끝부분에서의 마스크 들림 정도를 나타내는 함수인 식 (28), (29)에 제시된 H1, H2 함수값의 조정으로 가능하다. x 방향으로 들러지는 마스크의 높이는 H1(x)로 표시되며 z 방향으로 들러지는 높이는 H1(z)로 표시된다. 여기서 마스크효과는 Er함수에 의하여 고려되었으며 이 Er함수는 다음의 식(30)과 식(31)로 표현된다.

$$Er(x) = P1 ( \operatorname{erfc}(en1(x)) + 3.141 \operatorname{Tox} ) \quad (30)$$

$$Er(z) = P2 ( \operatorname{erfc}(en2(z)) + 3.141 \operatorname{Tox} ) \quad (31)$$

위의 식 (30)과 (31)에서 계수 P1, P2는 들림높이의 크기를 제어하는 파라미터이며 en1, en2는 x 및 z의 함수로 표현하여 마스크의 형태, 두께등에 따라 형상의 변화를 제어하는 파라미터로써 실험치의 분석으로부터 얻는다.

### 2. 3차원 수치적 산화모델의 구축

2차원 비평탄 실리콘 구조에서 고도의 비균일 산화층을 이용한 트랜치나 LOCOS 같은 소자격리용 구조를 위한 다양한 산화막 성장모델이 제안되어왔다. 점성<sup>17)</sup>, 탄성<sup>18)</sup>, 점탄성<sup>19)</sup> 그리고 플라스틱 모델<sup>110)</sup> 등이 산화공정을 위한 모델로 제안되어 왔으나 최근들어 산화층내에 존재하는 기계적 응력효과를 고려한 점성 모델이 널리 채용되고있는 경향이다<sup>111) 112)</sup>. 하지만 이러한 모델들은 모두 2차원적인 모델들이며, 이들 모델을 3차원적으로 확장하기에는 새부리 영역부분의 정확한 시뮬레이션이 어렵고, 해의 안정성을 이룩하기에 무리가 있다. 따라서, 3차원적인 산화층의 이동을 정확히 기술하는 방정식의 연구가 아직 미흡한 상황에서 본 연구에서는 산화층 확산은 3차원 확산방정식을 정상상태로 가정하여 3차원 Laplace 방정식으로부터 계산하며 산화물 이동방정식은 기본적으로 산화층/실리콘의 경계상으로 유입되는 산화층의 농도로부터 형성되어지는 산화층의 부피 팽창의 속도를 계산하고 이로부터 산화층의 아래와 위의 좌표점을 도출하는 방법을 사용한다.

#### 1) 산화층 확산방정식의 수치해석

모델방정식들의 이산화를 위하여 본 연구에서는 경계요소법을 적용한다. 이는 경계요소법이 다음과 같은 특징을 갖고 있기 때문이다. 우선 요소분할이 경계에서

만 시행되므로 간편하고 문제의 차수가 1차원 줄어든다. 또한 행렬식의 크기가 소규모이므로 수행속도가 빠르며 반복법대신에 가우스 소거법 사용이 가능하므로 정확도가 개선된다. 또한 적용범위가 매우 넓어 무한영역, 자유 이동경계, 형상결정문제, 특이응력문제, 비선형경계문제등에 특히 유용하기 때문에 산화막 이동문제에 매우 효율적이다. 그리고 문제영역 내부변수값은 격자망구성 없이 구할 수 있을 뿐더러 동일한 경계요소수에서 차분근사법(FDM)이나 유한요소법(FEM)에 비해 수행속도, 정확도가 우수하다.<sup>113) 114)</sup>

초기의 기체상태의 산화층들이 패드산화층을 통하여 확산하는 과정은 3차원적인 확산방정식으로 구할 수 있는데, 이때 산화층내의 산화층 확산을 정상상태라고 가정하면 확산방정식은 다음과 같은 라플라스 형태의 식과 같으며 이를 경계요소법을 이용하여 해를 구한다.

해석영역을 지배하는 3차원 라플라스 방정식과 경계 S1, S2의 경계조건을 f, g라고 정의한다.

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = 0 \quad (u = u(x, y, z); (x, y, z) \in D) \quad (32)$$

$$u = f \quad ((x, y, z) \in S_1), \quad (33)$$

$$\frac{\partial u}{\partial n} = g \quad ((x, y, z) \in S_2; \frac{\partial}{\partial n})$$

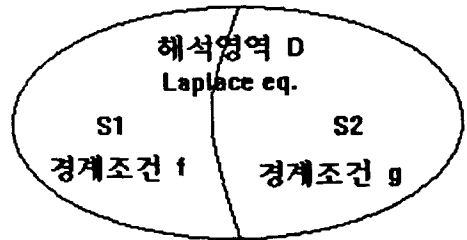


그림 3. 해석 영역 및 경계조건  
Fig. 3. Solution domain and boundary conditions.

식(32)를 적분표시로의 변환된 형태의 식으로 표시하면 식(34)로 변환할 수 있다. 이 식에서 해석하고자 하는 곳을 점 P, 경계에 해당하는 점을 Q라고 정의하였으며, rPQ 는 점 P, Q사이의 거리이다.

$$0 = - \int \int_{S_1} \left\{ \frac{\partial}{\partial n_Q} \left( \frac{1}{r_{PQ}} \right) \cdot f_Q - \frac{1}{r_{PQ}} \cdot \frac{\partial u}{\partial n_Q} \right\} dS_Q - \int \int_{S_2} \left\{ \frac{\partial}{\partial n_Q} \left( \frac{1}{r_{PQ}} \right) \cdot f_Q - \frac{1}{r_{PQ}} \cdot g_Q \right\} dS_Q - \begin{cases} 2\pi u_P & (P \in S : \text{경계점}), \\ 4\pi u_P & (P \in D : \text{내부점}). \end{cases} \quad (34)$$

위의 식(34)에 의하여 해석하고자 하는 곳이 경계에 위치하고 있는 경우, 즉  $P \in S$  의 경우에는 미지량을 좌변으로 기지량을 우변으로 이항하여 식을 정리하면 식(35)와 같이 표현된다.

$$\int \int_S \frac{1}{r_{PQ}} \frac{\partial u}{\partial n_Q} dD_Q - \int \int_S \frac{\partial}{\partial n_Q} \left( \frac{1}{r_{PQ}} \right) \cdot u_Q dS_Q - 2\pi u_P \quad (35)$$

$$= \int \int_S \frac{\partial}{\partial n_Q} \left( \frac{1}{r_{PQ}} \right) \cdot f_Q dS_Q - \int \int_S \frac{1}{r_{PQ}} \cdot g_Q dS_Q$$

해석하고자 하는 점 P가 내부영역 D에 있는 경우, 즉  $P \in D$  인 경우에 식(34)를  $4\pi u_P$ 에 대하여 구하면 식(36)과 같다.

$$4\pi u_P = - \int \int_S \left\{ \frac{\partial}{\partial n_Q} \left( \frac{1}{r_{PQ}} \right) \cdot f_Q - \frac{1}{r_{PQ}} \cdot \frac{\partial u}{\partial n_Q} \right\} dS_Q \quad (36)$$

$$- \int \int_S \left\{ \frac{\partial}{\partial n_Q} \left( \frac{1}{r_{PQ}} \right) \cdot f_Q - \frac{1}{r_{PQ}} \cdot g_Q \right\} dS_Q$$

다음은 경계를 요소로 분할하는 형식으로써 경계면 S를 2부분으로 S1, S2라고 부르는 두 영역으로 분할하고 각 영역에 대해 유한개의 삼각형 요소로 분할한다. 여기서 S는 평면에 놓여있지만, 산화층이 성장하는 중간과 후에는 곡면형태가 되므로 초기의 평면 삼각형 또한 곡면상의 삼각형으로 변형되고 그 곡면 삼각형은 곡면상의 곡선으로부터 구성된다.

초기 구조의 표면은 평면으로 되어 있으며, 각 경계조건에 따른 두 부분으로 나눈 영역 S1, S2에서 S1을 i개의 요소  $\sigma_1, \dots, \sigma_i$ 로 분할하고, S2는 N-1개의 요소  $\sigma_{L+1}, \dots, \sigma_N$ 로 분할되어 있다고 정의한다.

이때, S상의 곡면상의 삼각형은  $\sigma_j$  ( $j=1, \dots, N$ )의 3개의 절점을 정점으로 하고, 각 변의 선분으로부터 이루어진다. 이 곡면으로 이루어진 삼각형을 평면상에 존재하는 삼각형의 형태로 변환하여 주면, 평면 삼각형은 요소  $T_j$  ( $j=1, \dots, N$ )로 부터 구성된다. 이 평면상의 삼각형을 이루는 요소  $T_j$  ( $j=1, \dots, N$ )의 합을  $\Sigma_1$ 라고 정의한다. 또한, 요소  $T_{L+1}, \dots, T_N$ 의 합을  $\Sigma_2$ 라고 하며 그림 4.와 같다.

식 (35)와 (36)을 경계 적분 요소로의 분할로 변환하고, 점  $P \in \Sigma$  가 요소  $T_j$ 의 중심P인 점을 기준으로 연립 1차 방정식으로 근사 시키면 각각 식(37)과 식(38)로 유도된다.

$$\sum_{j=1}^L \left\{ \int \int_{r_{PQ}} \frac{1}{r_{PQ}} dS_Q \right\} \frac{\partial u}{\partial n_Q} - \sum_{j=L+1}^N \left\{ \int \int_{r_{PQ}} \frac{\partial}{\partial n_Q} \left( \frac{1}{r_{PQ}} \right) dS_Q \right\} u_j - 2\pi u_P$$

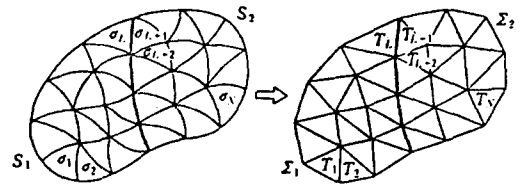
$$= \sum_{j=1}^L \left\{ \int \int_T \frac{\partial}{\partial n_Q} \left( \frac{1}{r_{PQ}} \right) dS_Q \right\} f_j - \sum_{j=L+1}^N \left\{ \int \int_T \frac{1}{r_{PQ}} dS_Q \right\} g_j \quad (i=1, \dots, M).$$

$$(37)$$

$$4\pi u_P = - \sum_{j=1}^L \left\{ \int \int_T \frac{\partial}{\partial n_Q} \left( \frac{1}{r_{PQ}} \right) dS_Q \right\} f_j + \sum_{j=L+1}^N \left\{ \int \int_T \frac{1}{r_{PQ}} dS_Q \right\} \frac{\partial u}{\partial n_Q}$$

$$- \sum_{j=L+1}^N \left\{ \int \int_T \frac{\partial}{\partial n_Q} \left( \frac{1}{r_{PQ}} \right) dS_Q \right\} u_j + \sum_{j=L+1}^N \left\{ \int \int_T \frac{1}{r_{PQ}} dS_Q \right\} g_j \quad (P \in G).$$

$$(38)$$



$$\Sigma = \Sigma_1 + \Sigma_2$$

그림 4. 요소를 이루는 곡면삼각형과 평면삼각형  
Fig. 4. Planar triangle and curved triangle

### 2) 산화층 성장

기존에 존재하고 있는 산화층을 확산하여 실리콘/산화층 경계면에 도달한 산화족은 실리콘과 화학반응을 하여 초기의 경계면을 기준으로, 실리콘 방향으로 전체 성장 두께의 약44%와 표면방향으로 약56%의 비율로 성장하게 된다. 이에 산화층 표면으로 들어오는 산화족 Flux를 F1, 산화층을 통과하여 확산하는 산화족을 F2, 실리콘표면에서 반응하는 산화족을 F3라 하고, 정상상태에서는 이들 세 Flux가 동일함으로 다음과 같은 식(39)로 나타낼 수 있다. [15]

$$F_1 = F_2 = F_3 = F \quad (39)$$

$$F = \frac{c^*}{\frac{1}{k_s} + \frac{1}{h} + \frac{x_0}{D}} \quad (40)$$

- $x_0$  = 기존 산화막의 두께
- $h$  = 산화족의 표면 질량전달 계수
- $D$  = 산화막내에서의 산화족 확산 계수
- $k_s$  = 표면반응을 계수
- $C^*$  = 산화막내에서의 산화족 고용도

실리콘 기판으로 확산해오는 산화족의 양은 극히 적기에, 실리콘 기판으로 유입되는 산화족의 전부는 실리콘 원자와 경계에서 반응하고 새로운 산화층을 형성한다고 할 수 있다. 그러므로 산화층의 성장율은 소비되는 산화족으로부터 직접 계산할 수 있다.

$$\frac{dx_0}{dt} = \frac{F}{N_1} \quad (41)$$

$$N_1 = 2.2 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$$

위의 식 (41)에서  $x_0$ 는 산화층의 성장 두께,  $dt$ 는 단위 시간을 나타내며  $N_1$ 은 산화층내의 단위체적당 산소 분자의 수,  $F$ 는 산화족 플럭스 또는 단위시간당 계면에 도달하는 산소분자수를 나타낸다.

### III. 결과 및 분석

본 연구를 통하여 개발한 3차원 산화공정 시뮬레이터는 빠른 계산 시간 안에 결과를 얻을 수 있는 해석적인 모델과 비교적 넓은 범위에서의 공정 조건에서도 정확한 결과를 얻을 수 있는 수치적인 모델로 구성되어 있다.

먼저 해석적인 모델을 통한 시뮬레이션을 위해서 그림5.에 초기 시뮬레이션에 관한 구조를 나타내었다. 그림5. (a),(b)의 구조에 대한 결과들이 그림6., 그림7.에 각각 제시하였다. 그림 6.의 (a)에서 곡선은 새부리영역의 끝점을 연결한것으로 마스크 모서리에서의 새부리 영역의 축소현상을 보여준다. (b)에서는 점선으로 표시된 a-b 단면형상과 실선으로 표시된 a-c 단면형상과의 비교를 통하여 공구조에서의 3차원 효과를 잘 보여주고있다. 그림 7.의 (a)에서는 마스크 모서리에서 새부리 영역의 증가현상을 보여주며, (b)에서는 섬구조의 3차원 효과를 보여주고있다. 이들 결과를 보면 3차원적인 마스크의 영향으로 공구조와 섬구조에서 각 마스크의 모서리 부분에서는 직선적인 마스크의 구조에서와는 다른 산화층의 성장을 관찰할 수 있다. 이는 마스크의 구조적인 영향으로 인한 산화족의 확산율과 더불어 마스크가 가하는 압력의 상이함으로부터 기인한다고 볼 수 있다. 또한, 그림 8.의 비교된 산화막은  $1000^\circ\text{C}$ 에서 170분간 습식 산화시킨 것이며 질화막두께는  $0.12\mu\text{m}$ , 초기산화층의 두께는  $0.05\mu\text{m}$ 이다. (a)의 SEM 사진은 새부리영역의 경계선을 확인하기 위하여 질화막과 약 $1000\text{\AA}$ 정도의 산화층을 식각

처리하여 실리콘영역 (어두운 부분)과 산화막영역 (밝은 부분)의 경계선을 뚜렷이 나타내도록 한것이다. 사진에서 백색실선은 타 논문 [16]에서 FEM으로 풀어난 수치해의 결과이다. (b)에서 새부리영역의 경계선은 (a)의 실험조건과 일치하도록  $1000\text{\AA}$ 의 두께를 갖는 산화층의 위치를 연결한 것이며 마스크 모서리효과를 보다 정확히 관찰하기 위하여 모서리영역을 333% 확장하였다. 실험결과와의 비교에서 2차원적인 새부리영역의 길이( 시뮬레이션: $0.5\mu\text{m}$ , 실험:약  $0.51\mu\text{m}$ )와 마스크 모서리에서 발생하는 새부리 감소 효과( 시뮬레이션:32.5%, 실험:약 35%)가 모두 잘 일치하는 것으로 나타났다.

그림 9.는 그림 5.(c)fully-island 구조에서 마스크의 크기를  $1.0\mu\text{m} \times 1.0\mu\text{m}$ 에서  $0.3\mu\text{m} \times 0.3\mu\text{m}$  까지 축소하면서 시뮬레이션 수행한 후의 결과를 보여주고 있다. 또한 그림 10.은 그림5. (d)Line-island 구조에서 마스크의 폭만을  $1.0\mu\text{m}$ 에서  $0.3\mu\text{m}$ 로 축소하였을 때의 시뮬레이션 결과를 보여준다. 그림9.에서는 마스크의 크기가 작아짐에 따라 마스크의 휘어짐 현상이 감소하고 마스크의 전체적인 들림 현상이 발생함을 알 수 있으며, 또한 마스크의 크기가  $0.3 \times 0.3 \mu\text{m}^2$  이하에서는 마스크의 들림 현상만이 현저하게 나타남이 확인되었다. 마스크 부분의 들어올림 현상이 생기는 부분은 새부리 영역으로의 큰 산화족 확산으로 인한 산화층의 성장으로 소자형성을 어렵게 한다. 그림10.에서 알 수 있는 바와 같이 마찬가지로 Line-Island 구조에서는 마스크의 폭이  $0.3\mu\text{m}$  이하로 적어지는 경우 급격한 마스크의 들림 현상으로 인한 새부리영역의 확대로 말미암아 추후 공정상의 어려움이 뒤따르리라고 예측된다.

그림11.에서는 마스크 크기의 축소에 의한 시뮬레이션 결과에서 마스크의 중심 부분 아래의 산화층의 두께 변화를 도시하였다. 즉, 시뮬레이션 분석 결과, 마스크의 폭 혹은 전체적인 크기가 어느 임계적인 크기 이하로 줄어들게 되면 현격한 마스크 아래로의 측면 산화족 확산으로 인한 새부리 영역의 확대 또는 마스크의 전체적인 들림 현상이 일어남을 관찰할 수 있다. 이와 같은 현상을 제거하기 위해서는 기존의 LOCOS 구조에서는 최소한  $0.3\mu\text{m}$  이상의 폭과 넓이를 갖는 마스크를 사용하거나, 마스크 두께의 증가 및 Pad 산화층 두께를 더욱 얇게 하는 구조에서의 산화공정이 필요하리라 생각된다. 1 giga DRAM 공정에 필

요한  $1/4\mu\text{m}$ 이하 폭을 갖는 차세대 반도체 메모리 소자 제작을 위한 LOCOS공정에서는 기존의 LOCOS구조를 수정, 개선화 시킨 산화격리 구조의 사용이 필요하리라 사료된다.

수치적 모델의 3차원 산화 시뮬레이터에서도 위의 해석적 모델의 시뮬레이터에서 관찰한 현상들이 나타나며, 이 시뮬레이션 수행을 위한 초기의 마스크 패턴을 그림12.에 보였다. 그림 13.과 그림 14.에서 산화층/실리콘 경계에서의 산화층 등고선 분포(a-1)와, 산화층/외부 경계에서의 등고선 분포(a-2)를 나타내었으며, 3차원 형상(b)을 나타내었다. 하지만 이들 3차원 형상으로는 정확한 산화층의 증배, 감소 현상을 관찰하기 어려우므로 시뮬레이션 결과의 구조를 대각선방향과 직선 방향으로 자른 단면을 각각 그림15.와 그림 16.에 나타내었다. 그림에서 실선은 대각선 방향의 단면을 나타내고 점선은 직선 방향의 단면을 나타낸다. 이들 그림으로부터 공구조에서는 마스크의 모서리에서 산화층의 증배를 볼 수 있고, 섬구조에서는 마스크 모서리 부분의 산화층 성장 감소 현상이 나타남을 용이하게 확인할 수 있다.

1. 해석모델의 시뮬레이션 결과

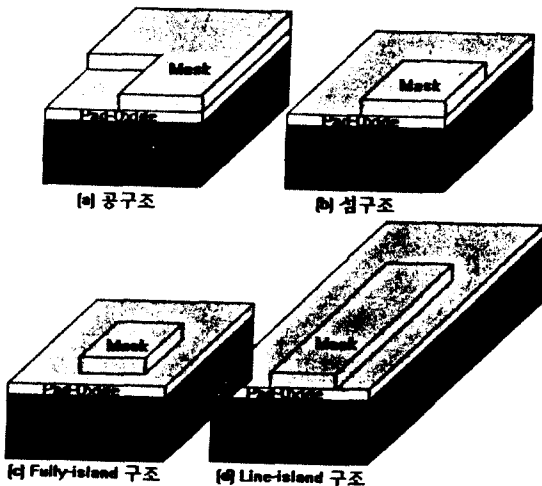


그림 5. 해석모델 시뮬레이션을 위한 초기 구조 (a) 공구조 (b) 섬구조 (c) Fully-Island 구조 (d) Line-Island 구조

Fig. 5. Initial simulation domain for analytic

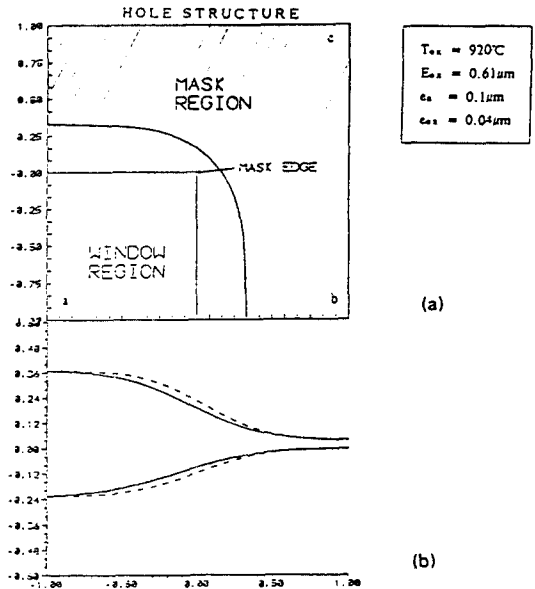


그림 6. 3차원 공구조 결과 (a)새부리경계 (b)단면형상.

Fig. 6. Results of three-dimensional hole structure (a) Bird's beak edge (b) cross-sectional LOCOS shape

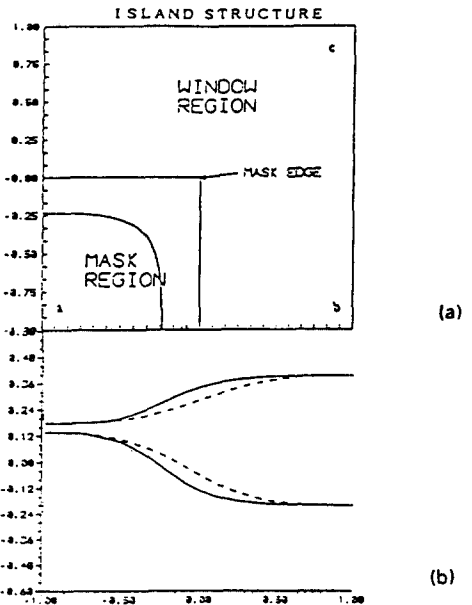
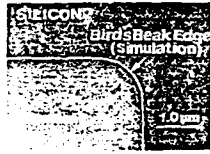
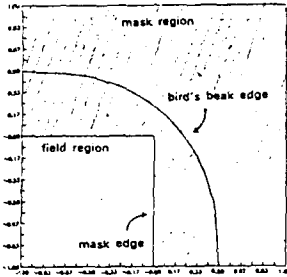


그림 7. 3차원 섬구조 결과 (a)새부리경계와 (b)단면형상.

Fig. 7. Results of three-dimensional island structure (a) Bird's beak edge and (b) cross-sectional LOCOS shape



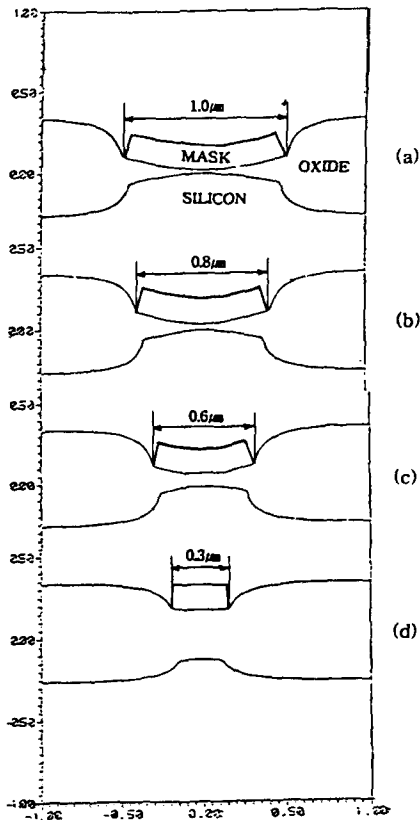
(a)



(b)

그림 8. 3차원 산화막 공구조에서의 해석해와 실험치 비교. (a) 산화막 표면에서의 SEM 사진 (b) 시뮬레이션 결과.

Fig. 8. Comparison of SEM photography with a result of analytical calculation (a) Top-view SEM photograph (b) simulation result.



(a)

(b)

(c)

(d)

그림 9. 3차원 산화막 Fully-Island 구조에서의 마스크 크기 축소로 인한 새부리 영역 및 형상 변화 (a) 마스크 크기  $1.0 \times 1.0 \mu\text{m}^2$  (b) 마스크 크기  $0.8 \times 0.8 \mu\text{m}^2$  (c) 마스크 크기  $0.6 \times 0.6 \mu\text{m}^2$  (d) 마스크 크기  $0.3 \times 0.3 \mu\text{m}^2$

Fig. 9. Bird's beak region and oxide shape variation with mask size decreasing in fully-island structure. (a) Mask size  $1.0 \times 1.0 \mu\text{m}^2$  (b) Mask size  $0.8 \times 0.8 \mu\text{m}^2$  (c) Mask size  $0.6 \times 0.6 \mu\text{m}^2$  (d) Mask size  $0.3 \times 0.3 \mu\text{m}^2$

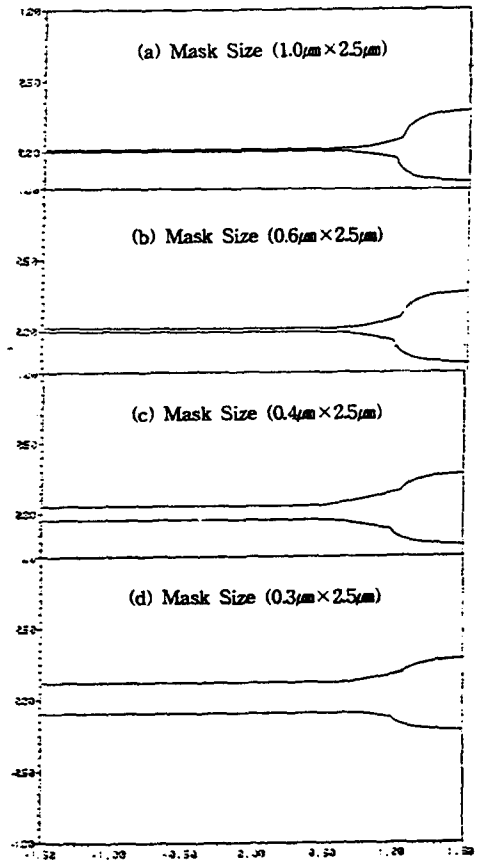


그림 10. 3차원 산화막 Line-Island 구조에서의 마스크 크기 축소로 인한 새부리 영역 및 형상 변화 (a) 마스크 크기  $1.0 \times 2.5 \mu\text{m}^2$  (b) 마스크 크기  $0.6 \times 2.5 \mu\text{m}^2$  (c) 마스크 크기  $0.4 \times 2.5 \mu\text{m}^2$  (d) 마스크 크기  $0.3 \times 2.5 \mu\text{m}^2$

Fig. 10. Bird's beak region and oxide shape variation with mask size decreasing in line-island structure. (a) Mask size  $1.0 \times 2.5 \mu\text{m}^2$  (b) Mask size  $0.6 \times 2.5 \mu\text{m}^2$  (c) Mask size  $0.4 \times 2.5 \mu\text{m}^2$  (d) Mask size  $0.3 \times 2.5 \mu\text{m}^2$



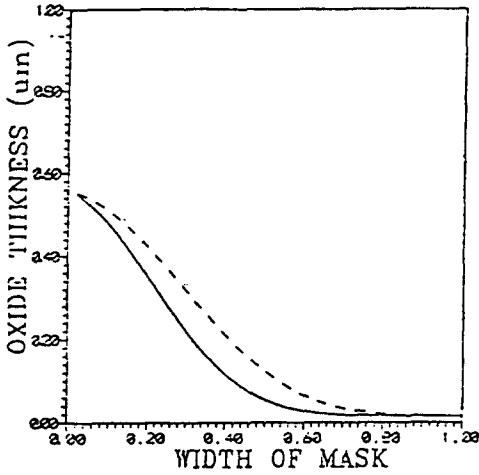
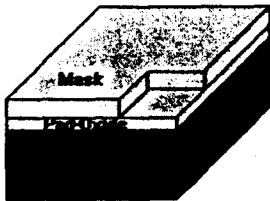
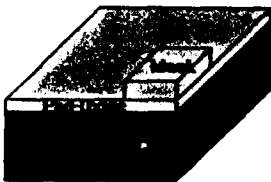


그림 11. 3차원 산화막 성장시 마스크 크기 변화에 따른 산화층 두께 변화(실선:Line-Island 구조, 점선:Fully-Island 구조)  
 Fig. 11. Variation of center oxide thickness with mask size. (Solid line:Line-Island 구조, dotted line:Fully-Island 구조)

2. 수치모델의 시뮬레이션 결과



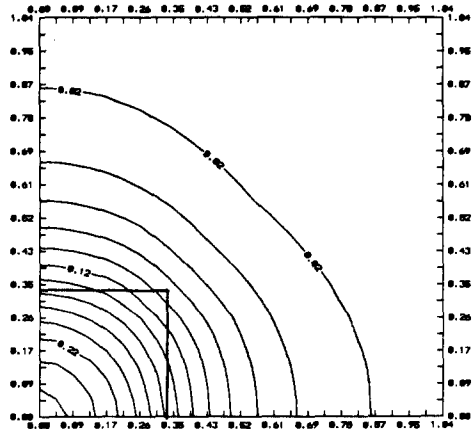
(a) 공구조



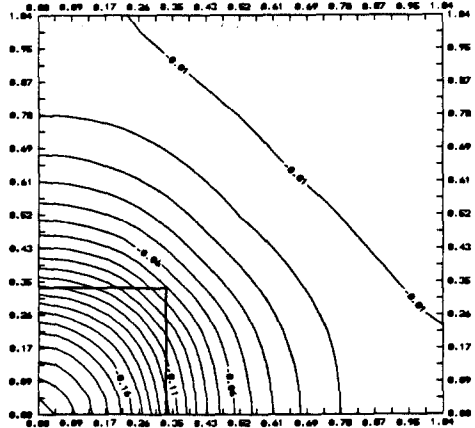
(b) 섬구조

그림 12. 수치모델 시뮬레이션을 위한 초기 구조  
 (a) 공구조 (b) 섬구조

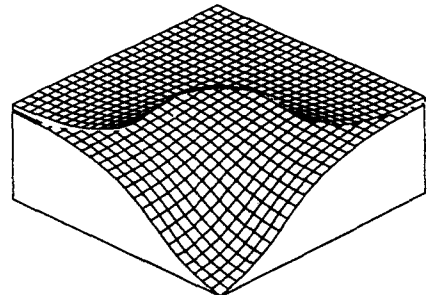
Fig. 12. Initial simulation domain for numerical module simulation.  
 (a) Hole structure (b) Island structure



(a-1) 실리콘/외부 경계의 산화층 등고선



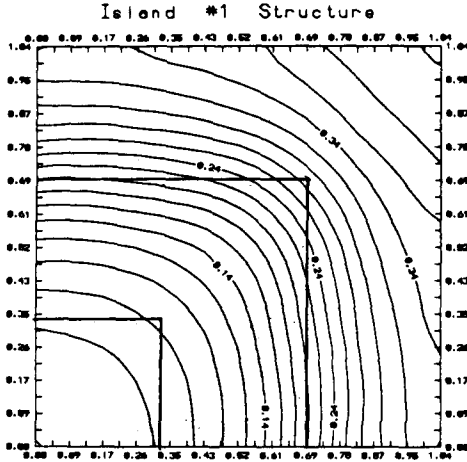
(a-2) 실리콘/산화막 경계의 산화층 등고선



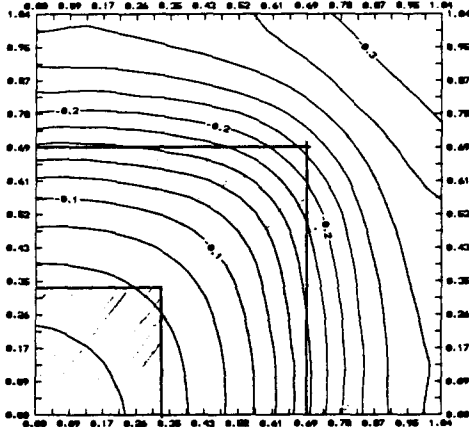
(b) 3차원 형상

그림 13. 공구조에서의 형상  
 a) 등고선의 분포 b) 3차원 형상

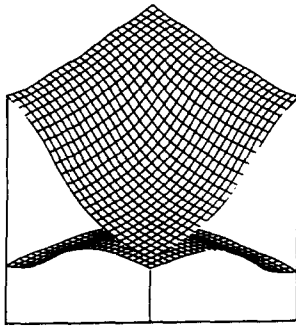
Fig. 13. Oxide shape in Hole structure.  
 a) Contour line b) 3 dimensional shape



(a-1) 실리콘/외부 경계의 산화층 등고선



(a-2) 실리콘/산화막 경계의 산화층 등고선



(b) 3차원 형상

그림 14. 섬구조에서의 형상  
a) 등고선의 분포 b) 3차원 형상  
Fig. 14. Oxide shape in Island structure.  
a) Contour line b) 3 dimensional shape

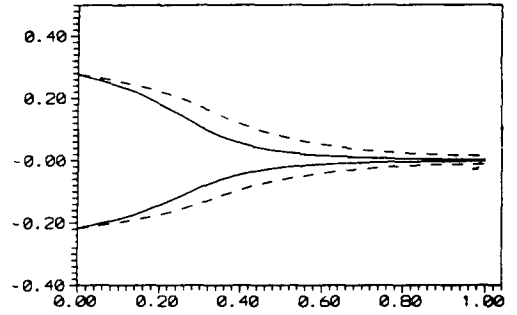


그림 15. 공구조에서의 단면 형상  
Fig. 15. Cross section view in Hole structure.

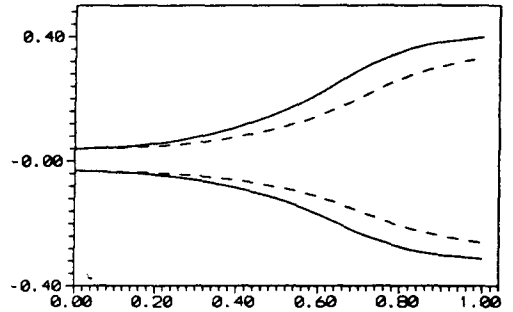


그림 16. 섬구조에서의 단면 형상  
Fig. 16. Cross section view in Island structure.

#### IV. 결론

산화 공정에 관한 모의실험 및 산화층 성장의 특성을 관찰하기 위하여 해석적 방법과 수치해석적 방법으로 3차원 산화 시뮬레이터를 개발하였다. 해석모델을 사용한 시뮬레이터 모듈과 수치모델을 이용한 시뮬레이터 모듈의 시뮬레이션 결과를 분석한 결과 마스크의 구조에 따라 산화층의 성장이 다르게 나타남을 알 수 있었다. 또한 실험치와의 비교로 이러한 현상들의 효과와 시뮬레이터의 정확성을 확인하였다. 즉, 마스크가 꺾이는 모서리 영역에서 산화층의 성장은 공구조에서는 직선적인 마스크 영역보다 억제되며, 섬구조에서는 산화가 증배되는 효과를 얻을 수 있었다. 마스크의 크기가  $0.3\mu\text{m}$  보다 작아지게 될 경우 이러한 현상이 더욱 두드러져, 마스크의 휘어짐 현상보다 전체적인 마스크의 들림 현상이 현저하게 일어나게 된다. 이와 같은

현상을 제거하기 위해서는 기존의 LOCOS 구조에서는 최소한  $0.3\mu\text{m}$  이상의 폭과 넓이를 갖는 마스크의 사용, 마스크 두께의 증가 및 얇은 두께의 Pad 산화층을 사용한 구조에서의 산화공정이 필요하리라 생각된다.

1 giga DRAM 공정에 필요한  $\frac{1}{4}\mu\text{m}$  이하 폭을 갖는 차세대 반도체 메모리 소자제작을 위한 LOCOS공정에서는 기존의 LOCOS구조를 수정, 개선화시킨 산화격리 구조의 사용이 필요하리라 사료된다.

본 연구로 개발된 산화 공정 시뮬레이터를 사용함으로써, 3차원적인 구조에서의 산화층 성장 형상에 관한 예측이 가능하며, 기존 LOCOS 구조의 공정 조건에 관한 최적화 및 신 기술의 최적 격리구조 개발이 가능할 것으로 기대된다.

#### 참 고 문 헌

- [1] W.A. Pliskin and R.A. Gdula, *Handbook on Semiconductor*, Vol 3., North Holland Publ., 1980.
- [2] E.H. Nicollian and J.R. Brew, *Mos Physics and Technology*, John Wiley, 1981.
- [3] S. Wolf, *Silicon Processing for the VLSI Era Volume 3, Lattice Press*, 1995.
- [4] 이 준하, 권 오근, 박 화식, 황 호정, "LOCOS 구조에서의 3차원적 마스크 모서리 효과를 위한 해석모델," 대한전자공학회 추계학술발표회 논문집, 제15권, 제2호, pp. 280-283, 1992.
- [5] S. Odanaka, H. Umimoto, M. Wakabayashi and H. Esaki, "SMART-P: Rigorous Three-Dimensional Process Simulator on a Supercomputer" *IEEE Trans. on Computer-Aided Design*, Vol. 7, No.6, June, 1988.
- [6] N. Guillemot, G. Pananakakis, and P. Chenevier, "A New Model of the 'Bird's Beak'," *IEEE Trans. on Electron Devices*, Vol. ED-34, No.5, pp.1033-1038, 1987.
- [7] D.J. Chin et. al., "A General Solution Method for Two-dimensional Nonplanar Oxidation," *IEEE Trans. on Electron Devices*, Vol. ED-30, No.9, pp. 993-998, Sep.1983.
- [8] C. Collard, B. Baccus, B. Hamonic, "A Robust Numerical Procedure for Stress Dependent 2d-oxidation Simulation," *NUPAD IV*, pp. 21-26, 1992.
- [9] P. Sutardja, W.G. Oldham, "Modeling of Stress Effect in Silicon Oxidation," *IEEE Trans. on Electron Devices*, Vol. ED-36, No.11, pp.2415-2421, 1989.
- [10] C.S. Rafferty, L. Borucki and R.W. Dutton, "Plastic Flow During Thermal Oxidation of Silicon," *Appl. Phys. Lett.* 54(16), pp.1516-1518, April 1989.
- [11] A. Seidl, V. Huber, E. Lorenz, "Implementation of Models for Stress-reduced Oxidation into 2-D Simulator," *Proc. of Simulation of Semiconductor Devices and Processes*, Vol. 3, pp. 277-288, Sep. 1988.
- [12] H. Matsumoto and M. Fukuma, "Numerical Modeling of Nonuniform Si Thermal Oxidation," *IEEE Trans. on Electron Devices*, Vol. ED-32, No.2, pp. 132-140, Feb.1985.
- [13] T.L. Tung, et al., "A Boundary Element Method for Modeling Viscoelastic Flow in Thermal Oxidation," *IEEE Trans. on Computer-Aided Design*, Vol. 7, No.2, pp. 215-224, Feb. 1988.
- [14] C.A. Brebbia and S. Walker, *Boundary Element Techniques in Engineering*, Newnes-Butterworths, 1980
- [15] A.S. Grove, *Physics and Technology of Semiconductor Device*, Wiley, 1967
- [16] H. Umimoto and S. Odanaka, "Three-Dimensional Numerical Simulation of Local Oxidation of Silicon," *IEEE Trans. on Electron Devices*, Vol. 38, No.3, pp. 505-511, 1991.

— 저 자 소 개 —



李俊賀(正會員)

1966년 10월 10일생. 1990년 2월 중앙대학교 전자공학과 졸업. 1992년 2월 중앙대학교 일반대학원 전자공학과 석사. 1992년 9월-현재 중앙대학교 일반대학원 전자공학과 박사과정. 주 관심분

야는 반도체 소자 및 공정 물리, 모델링과 시뮬레이션등임

黃好正(正會員) 제26권 제7호 참조

현재 중앙대학교 전자공학과 교수