

論文97-34D-3-9

# 3차원 산화 공정을 위한 유한요소법 수치 해석기 개발에 관한 연구 (Development of Finite Element Numerical Simulation for Three-dimensional Oxidation)

李濟熙\*, 尹相鎬\*, 宋在福\*, 金演泰\*, 元太映\*

(Jaehee Lee, Sangho Yoon, Jaebok Song, Yountae Kim, and Taeyoung Won)

### 요 약

최근 새로운 소자의 개발과 미세화에 따라서 3차원 비평탄 실리콘 구조에 대한 산화는 매우 중요한 역할을 하게 되었다. 본 연구에서는 3차원 수치해석기를 이용하여 산화막의 3차원적 거동을 모델링하고, 시뮬레이션하였다. 산화막의 성장에서는 산화제의 확산과 산화막의 변형이 동시에 이루어진다. 각 시간 단계마다 산화막의 경계면이 3차원 곡면을 이루면서 이동하게 되므로, 이동하는 산화막의 경계면 부근에서 발생하는 오차의 감소를 위하여 효율적인 노드의 생성과 소멸 알고리즘이 필요하다. 따라서, 본 연구에서는 이동하는 3차원 산화막의 경계면에서 노드의 생성 및 제거 기능을 지닌 최적의 3차원 메쉬 생성기를 개발하였고, 개발된 3차원 유한요소법 수치해석기를 사용하여 산화 공정을 시뮬레이션하였다.

### Abstract

With continued miniaturization and development of new devices, the highly nonuniform oxidation of three-dimensional non-planar silicon structures plays an increasingly important role. In this paper, the three-dimensional behavior of oxide growth is investigated by three-dimensional finite element numerical simulator. Growth of oxide is a coupled process of diffusion of oxidant and deformation of oxide. Because boundaries of oxide are moved in each time step and LOCOS structure is formed three-dimensional shape of surface, it is necessary to develop an efficient node control algorithm that can locally generate and eliminate the node. Therefore we have developed the optimized three-dimensional mesh generator which is capable of refining and eliminating the meshes at the moving boundary of oxide, and have developed three-dimensional finite element oxidation solver.

### 1. 서 론

차세대 반도체 제조 기술은 최소 선폭 0.1 $\mu$ m급의 가공 기술이 요구되므로, 고도의 반도체 장비 제조 기술 및 TCAD(Technology Computer-Aided De-

sign) 기술이 요구되고 있다. 반도체 제조 공정을 개발 하기 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 제비용의 효율성을 증대시킨다는 면에서 필수적이다.

\* 正會員, 仁荷大學校 電子電氣컴퓨터工學部 半導體 및 薄膜 技術 研究所

(Inha Research Institute of Semiconductor and Thin Film Technology, School of Electrical and Computer Engineering, Inha University)

※ 본 연구는 인하대학교 자체 연구비로 수행되었다.  
接受日: 1996年7月19日, 수정완료일: 1997年2月11日

256MB 또는 1GB급 이상의 반도체 메모리의 제조에 있어서는, 반도체 소자와 소자 격리 간격이 서브 하

프 마이크론(sub-half-micron) 수준으로 좁아짐에 따라, 토포그래피를 비롯한 물리적 제현상에 있어서 3차원 특성을 보이는 것으로 인식되고 있다. 특히, 마스크 윈도우 크기가 감소함에 따라 마스크 코너 부근의 기하학적 모습(topology)은 반도체 공정 설계에 있어서 매우 중요한 요인으로 작용하게 되었다. 따라서, 마스크 코너 부근의 3차원 형상에 대한 모델링과 시뮬레이션은 매우 시급한 과제로 인식되고 있다. 즉, 소자의 크기가 0.1 $\mu$ m급 이하로 축소됨에 따라, 종래에 관측하였던 2차원 단면 뿐 아니라, 단면과 수직 방향의 모양을 포함한 3차원 기하학적 형상의 예측의 필요성이 점차 증가하고 있는 것이다<sup>11)</sup>. 현재 미국의 Stanford 대학, 프랑스·독일 등의 우주 연합 콘소시움 등 세계 유수의 연구기관에서 3차원 산화 시뮬레이터 개발에 전력을 다하고 있지만, 방대한 메모리 처리 및 이동하는 메쉬의 정련화 등의 문제점이 아직 해결되지 않고 있다.

LOCOS(Local Oxidation of Silicon) 주위에 질화막 마스크가 존재하는 경우, 마스크의 모서리 부근에서 산화막의 3차원적인 거동은 다음 두 가지 이유에 기인하는 것으로 알려져 있다. 즉, 마스크의 코너 부근과 주위의 마스크의 변에서 산화제 농도의 차이와, 마스크 코너 부근 및 마스크의 모서리에서 나타나는 스트레스의 분포에 기인한다. 또한, 고집적도의 반도체 소자 제작에 사용되는 소자 격리용 산화막 성장 기술은 Full-Rox (Fully-Recessed-Oxide), SILO(Sealed Interface Local Oxidation), SWAMI(Side Wall Mask Isolation), STI(Shallow Trench Isolation) 등 평탄화를 위하여 다양한 형태의 방법을 사용하므로, 3차원 산화 시뮬레이터의 제작에 있어서 해석적인 방법을 적용할 수는 없는 실정이다. 따라서, LOCOS 또는 트렌치 공정을 위한 3차원 시뮬레이터는 수치해석적 모델을 사용하여 산화제의 산화막 내에서의 확산과 산화막 유동을 3차원적으로 모델링하여 풀어야 한다<sup>12)</sup>.

본 논문에서는 차세대 반도체 메모리 제조 기술 중 핵심 기술에 해당하는 열산화(thermal oxidation) 기술로 제작하는 LOCOS의 미세 3차원 형상을 컴퓨터 모의 실험을 통하여 예측할 수 있도록 유한요소법을 적용한 수치 해석기 개발 결과를 보고하고자 한다. 본 과제에서는 수치 해석적으로 풀어야 할 확산 방정식과 유동 방정식의 경계면이 각 계산 단계마다 이동하며, 또한 LOCOS 계면은 굴곡을 갖는 3차원 곡면을 이루

고 있으므로, 수치 해석을 위하여서는 노드의 생성 및 소멸에 대한 효과적인 노드 관리용 알고리즘의 개발이 필요하다. 따라서, 본 연구에서는 이동하는 3차원 경계면에서의 노드 생성 및 제거 기능을 지닌 최적의 3차원 메쉬 생성기를 개발하였고, 지배 방정식을 유한요소법(finite element method)으로 이산화시켜 수치 해석적으로 해를 구하는 3차원 산화 시뮬레이터를 개발하였다.

## II. 시뮬레이터의 구성 및 3차원 적응 메쉬 생성기

### 1. 3차원 산화 시뮬레이터의 구성

본 연구에서 개발한 3차원 산화 시뮬레이터는 그림 1에 도시한 바와 같이 구성되어 있다. 시뮬레이터의 각 모듈들은 데이터 포맷을 통하여 서로 연결되는데, 그림 1에서 보는 바와 같이 총괄 데이터 구조는 마스터 구조와 유한요소법 데이터 구조로 나뉘어 진다. 마스터 구조는 3차원 메쉬 생성기, 3차원 메쉬 정련화(refinement) 모듈, 3차원 결과 출력을 위한 후처리기(post-processor) 등을 연결하여 주는 역할을 한다. 3차원

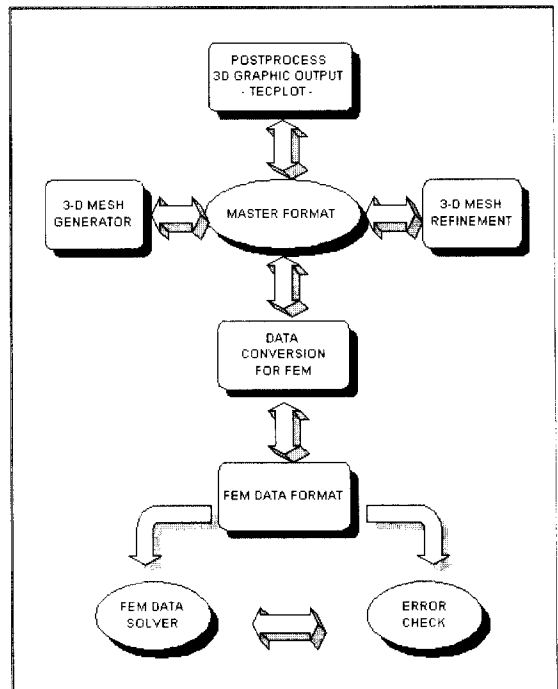


그림 1. 3차원 산화 시뮬레이터의 구성

Fig. 1. Structure of a three-dimensional oxidation simulator.

산화를 해석하는 유한요소법 연산기(FEM solver) 모듈과는 유한요소법 데이터 구조와 마스터 구조 사이에 데이터 변화기에 의하여 연결된다. 본 연구에서 제작한 산화 시뮬레이터는 최종적으로는 다른 공정 시뮬레이터들과 통합하여 연속적으로 공정을 수행하도록 제작되었다. 따라서 모든 종류의 공정 시뮬레이터를 위해 여러 가지 데이터가 필요하며, 때문에 본 논문에서 언급한 master format이 필요하며, 이 중 산화 공정을 수행하기 위한 데이터는 그 중의 일부이므로 불필요한 데이터와 풀고자 하는 수치해석기의 종류에 따라 그 데이터 형태가 변화되도록 데이터 변환기를 제작하였다. 유한요소법 데이터 구조는 유한요소법 연산기 모듈 및 오차 검색 모듈과 연결되는데, 유한요소법 연산기 모듈은 3차원 산화를 해석하는 모듈로서 3차원 확산방정식 해석기와 3차원 유동방정식 해석기로 구성된다. 오차 검색 모듈은 유한요소법 연산기에서 계산된 결과에 대한 오차를 계산하여 큰 오차가 발생할 경우 마스터 구조를 통하여 메쉬 정련화 과정을 수행하게 된다. 3차원 산화 시뮬레이터는 이러한 구성으로 각각의 모듈이 연결되어 시뮬레이션이 진행되는 동안 각각의 모듈을 순환하게 된다.

## 2. 유한요소법을 위한 3차원 적응 메쉬 생성기

본 논문에서는 3차원 산화 공정 시뮬레이션을 위하여 유한요소법을 사용하여 산화막 성장에 대한 확산방정식과 유동 방정식을 해석하였다. 산화막의 성장에 따라서 실리콘/산화막 경계면과 산화막/가스 및 산화막/질화막 경계면 등이 이동하게 되고, 유한요소법에 있어서는 계산의 오차를 줄이고, 해의 수렴 속도 증가시키기 위해서 산화막 내부에 새로운 노드들을 생성해야 하므로, 효과적인 3차원 적응 메쉬 생성기의 개발이 필수적이라 할 수 있다<sup>[3]</sup>. 본 연구에서 제작한 3차원 적응 메쉬 생성기는 메쉬의 기본 요소로 사면체(tetrahedra)를 사용하며, 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.

일반적으로 메쉬의 종류는 구조에 따라서 두 가지로 분류할 수 있다. 즉, structured mesh와 unstructured mesh로 구분할 수 있는데, 본 논문에서는 structured mesh를 사용하였다. Unstructured mesh

의 경우에는 메쉬를 생성하는 알고리즘이 structured mesh에 비하여 복잡하므로 초기 메쉬를 생성하는 시간이 많이 걸리는 단점이 있다. 특히, 3차원 시뮬레이터의 제작에 있어서 방대한 개수의 노드가 필요하게 되므로, 메쉬 생성에 소모되는 시간을 무시할 수 없게 된다. 또한, 본 논문에서 다루는 3차원 산화에 있어서는 이동하는 경계 문제를 해결하기 위한 메쉬 정련화(refinement) 과정이 필요하게 되는데, 이 점에 있어서 본 논문에서 개발한 3차원 메쉬 정련화 알고리즘을 사용하여 기본 메쉬 구조에 대한 많은 변형을 막을 수 있었다. 따라서, 이동하는 경계에 따라서 발생하는 메쉬 구조의 변형에 따른 mesh quality의 저하를 막을 수 있었고, 유한요소법을 사용한 수치해석적인 계산에 있어서도 큰 오차의 발생을 막을 수 있었다.

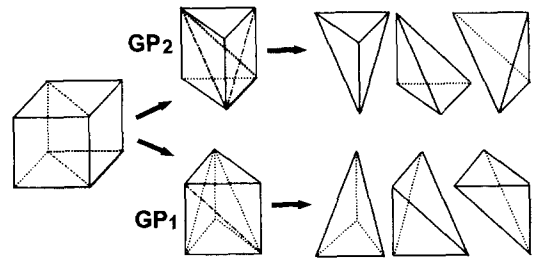


그림 2. 초기 메쉬의 생성을 위하여 육면체 구조를 두 개의 프리즘으로 분리하고, 각 프리즘을 세 개의 사면체들로 분해한다.

Fig. 2. Separate hexahedron into two prisms and each prism is divided into three tetrahedra for three-dimensional mesh structure.

생성되는 프리즘의 형태는 두 가지 종류로 구분될 수 있다. 그림 2에 도시한 바와 같이 초기의 메쉬 생성 과정에서 하나의 육면체 구조를 GP<sub>1</sub>과 GP<sub>2</sub> 형태의 프리즘으로 나누고, 각각의 프리즘을 세 개의 사면체로 분해하게 된다. GP<sub>1</sub>과 GP<sub>2</sub> 형태의 프리즘 분류는 메쉬의 생성과 제거가 이루어지는 영역에서만 정의함으로써 메모리를 효율적으로 관리하고, 계산 시간을 단축 시키게 된다.

정의된 GP<sub>1</sub>과 GP<sub>2</sub> 형태의 프리즘은 메쉬의 생성이 진행되는 과정에서 각각 GP<sub>10</sub>~GP<sub>13</sub>, GP<sub>20</sub>~GP<sub>23</sub>의 형태로 진화해 가게 되는데, 이러한 과정에서 생성되는 8가지 형태의 프리즘 구조를 그림 3에 도시하고 있다. 각 프리즘 구조의 이름은 GP<sub>X<sub>Y</sub></sub>으로서 표기할 수 있는

때, 첨자 X는 그림 2에 도시한 바와 같이 육면체 구조를 두 개의 프리즘 형태로 분리했을 때 정의되는 각각의 프리즘 중 한 종류를 나타내고, 첨자 Y는 프리즘의 세 개의 수직면 중에서 어느 면에 새로운 노드가 생성되었는지를 나타내는 값이 된다.

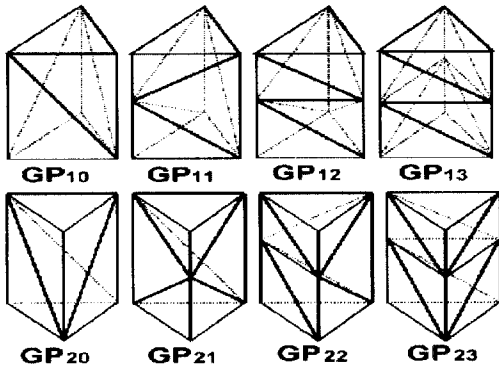


그림 3. 메쉬 정련화를 위하여 정의된 8가지 구조의 프리즘  
Fig. 3. Prism types for 3-D mesh refinement.

노드의 생성 과정은 정의된 프리즘들을 사용하여 다음과 같이 수행된다. 즉, 산화막 성장 시뮬레이션이 진행되면서, 정의된 프리즘에 대하여 PrismSide라고 정의하는 프리즘의 수직 면에 새로운 노드의 생성이 요구되는 경우를 검사한다. 정의된 각 PrismSide를 중심으로 이웃하고 있는 프리즘은 1~6개이다. 이 과정에서 새로운 노드의 삽입이 필요한 PrismSide에 대해서는 주위에 연결된 프리즘들을 그림 3에 정의한 8가지의 프리즘 형태를 사용하여 노드가 한 개씩 증가한 형태의 프리즘으로 변환하게 된다. 이렇게 미리 정의된 8가지 형태의 프리즘을 이용하여 메쉬 정련화 과정을 수행함으로써, 종래에 사용되었던 정련화 알고리즘의 문제점<sup>14)</sup>이었던 둔각 메쉬 모양의 생성 및 계산 시간의 증가 등을 해결할 수 있었다.

그림 4에 도시한 것은 3차원 구조에 대한 단면도로써, 프리즘을 사용한 메쉬의 정련화 과정을 설명하고 있다. 시뮬레이션의 초기에 산화막 내부에는 노드의 층이 존재하지 않고, 산화막 내부의 메쉬 구조는 모두 GP<sub>10</sub>과 GP<sub>20</sub>의 프리즘 형태로 초기화가 된다. 그 후, 산화막이 성장함에 따라서 그림 4(a)에 나타낸 바와 같이 산화막 내부에 새로운 노드 층이 생성되는데, 그림에서 진한 색으로 표시된 A-영역은 프리즘 구조가 모두 GP<sub>13</sub>과 GP<sub>23</sub>으로 변화한 영역을 나타낸다. 즉, 각

프리즘의 세 개의 수직한 면에 모두 새로운 노드가 생성되었음을 의미한다. 또한, A-영역이 끝나는 부분에 연한 회색으로 표시된 B-영역은 프리즘의 각 수직 면들에 노드가 모두 생성되지 않은 영역을 나타낸다.

이와 같이, 산화막 내부에 새로운 노드 층을 추가할 때 산화막 전체에 대하여 새로운 노드를 생성하지는 않고, 사면체 요소의 크기가 증가하여 오차를 유발할 수 있는 영역에 대하여만 메쉬의 정련화가 이루어진다. 이후의 새로운 메쉬 정련화를 위하여 그림 4(a)에서 A-영역을 구성하는 GP<sub>13</sub>과 GP<sub>23</sub>의 프리즘들은 각 프리즘 하부의 반쪽 프리즘 구조를 GP<sub>10</sub>과 GP<sub>20</sub> 구조로 다시 초기화한다. 그림 4(b)는 산화막의 성장이 계속 진행됨에 따른 산화막 내부 메쉬 구조의 변화 과정을 보여주고 있다.

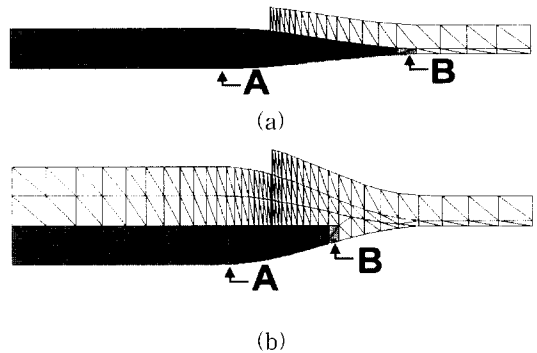


그림 4. 프리즘 구조를 사용한 3차원 메쉬 정련화 과정에 대한 단면도: (a) 진한 색으로 표시된 A-영역의 프리즘은 프리즘의 수직 면들에 모두 새로운 노드가 생성된 영역이고, 연한 회색으로 표시된 B-영역은 프리즘에 부분적으로 노드가 생성된 영역. (b) 산화막이 성장하면서 계속하여 새로운 노드 층들이 생성되는 과정

Fig. 4. Cross-sections of three-dimensional mesh refinement: (a) A-region is composed of fully refined prisms and B-region is composed of partially composed prisms. (b) Refinement is continued, then new layers are generated.

### III. 유한요소법을 사용한 3차원 산화 수치해석기

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 그림 5(a)에 도시된 바와 같이, 노출된 S2영역에서 산화제가 산화막을 통해 S1영역으로 확산된다. S3영역은 질화막으로 덮여 있는 영역이며, 따라서 산화제의 확산이 일어나지 않는 영역이 된다. S2영역에서는 질량 전달 계수에 의존하여 산화제의 농도가 결정되며, S2영역에서는 반응 계수에 의존하여 산화막의 성장률이 얻어진다. S4영역과 S5영역은 반사 경계조건(reflection boundary condition)이 적용되어 S1~S5의 경계조건이 포함된 확산 방정식을 계산한다. 실리콘 계면에서의 반응율이 계산되면, 그림 5(b)에 도시된 바와 같이 산화막의 성장 형태를 계산한다. 그림에서 'O'는 산화제의 확산을 표시하며, 'V'는 산화막의 성장 형태를 표시한다. 이러한 두 가지 과정은 다음과 같은 과정으로 계산하였다.

- i. 산화막을 통하여 실리콘 영역으로 확산하는 산화제의 확산 과정 계산
- ii. 산화막/실리콘 계면의 이동 속도 계산
- iii. 계면에서의 산화막 속도를 이용하여 산화막의 변형률 계산
- iv. 계산된 변형률을 이용한 각 노드의 이동
- v. 주어진 시간 동안 위의 과정 반복

위와 같은 순서로 산화 시뮬레이션을 수행하기 위하여 그림 6에 도시한 바와 같이, 확산 방정식과 유동 방정식은 먼저 유한요소법을 위한 약정식(weak form)으로 구성하여야 하며, 3차원 형상함수(shape function)를 결정하고, 구성된 약정식 형태의 지배 방정식은 각 요소 구간에서 계산하기 위하여 형상함수와 결합되어, 이산화(discretization) 된다. 각 요소에 대한 계산을 반복적으로 수행한 후, 최종적으로 각 요소에서 계산된 결과를 전체 행렬(global matrix)로 결합하여 계산 결과를 구한다<sup>[5]</sup>.

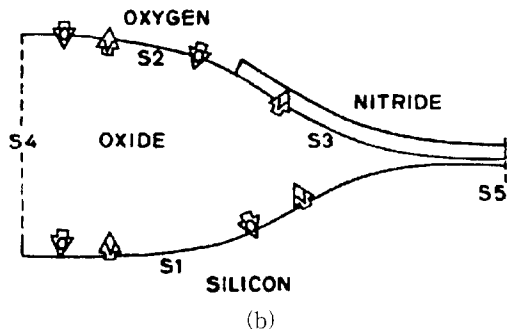
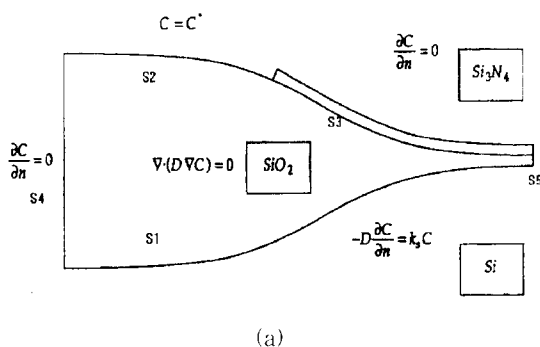


그림 5. 산화 시뮬레이션을 위한 지배 방정식의 경계조건: (a) 확산 방정식을 계산하기 위한 경계조건. (b) 산화막 형성을 위한 기본 조건.<sup>[6]</sup>

Fig. 5. Boundary conditions for governing equations: (a) Boundary conditions for diffusion equation. (b) Boundary conditions of oxide deformation.

먼저 산화막을 통해 실리콘 계면으로 확산되는 산화제의 확산을 계산하기 위하여 확산 방정식의 약정식 형태를 구한다. 일반적인 확산 방정식은,

$$F = D \cdot \nabla C \tag{1}$$

와 같이 표현된다. 식 (1)은 전체 영역에 걸쳐 보존 법칙을 만족해야 하므로,

$$\nabla \cdot [D \nabla C] = 0 \tag{2}$$

으로 표현된다. 가상 함수(virtual function)  $\phi$ 를 곱하고 적분형으로 형성된 약정식은 식 (3)과 같이 표현된다.

$$\int_{\Omega} \phi \nabla \cdot (D \nabla C) d\Omega = 0 \tag{3}$$

이와 같이 구성된 약정식 형태를 그린 법칙(Green theorem)을 이용하여 변화시키면, 식 (4)와 같이 요소 적분과 경계 적분의 형태로 변화시킬 수 있다.

$$\int_{\Omega} \nabla \phi D \nabla C d\Omega + \int_{\Gamma_1} \phi k_s C d\Gamma + \int_{\Gamma_2} \phi h C d\Gamma = \int_{\Gamma} \phi h C^* d\Gamma \tag{4}$$

식 (4)는 유한요소법으로 풀고자 하는 완전한 약정식으로 변환시킨 형태이며, 이제 식 (4)을 이용하여 강성 행렬(stiffness matrix)과 로드 벡터를 계산할 수 있다.

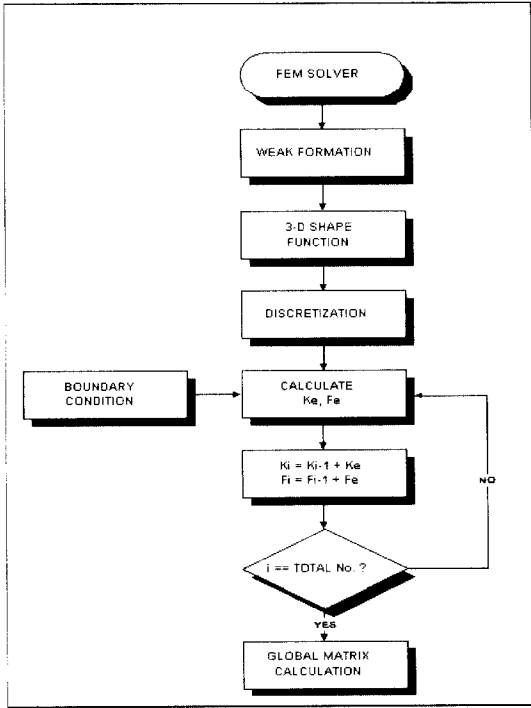


그림 6. 유한요소법을 사용한 산화 방정식의 계산 순서도

Fig. 6. Flow chart of calculation of oxidation using finite element method.

산화막의 유동과 형성에 대한 메커니즘은 여러 가지 형태로 표현할 수 있다. 그 중에서 유한요소법에 적합한 적분 형태의 유동/형성 방정식은 식 (5)와 같이 표현된다<sup>17)</sup>.

$$\int_{\Omega} \delta \epsilon \cdot \sigma d\Omega = \int_{\Gamma} \delta u \cdot f d\Gamma + \int_{\Omega} \delta u \cdot b d\Omega \quad (5)$$

여기서  $\epsilon$ 은 전단응력(strain tensor)을 의미하며,  $\sigma$ 는 스트레스를,  $u$ 는 시스템의 변위,  $f$ 는 시스템의 경계면( $\Gamma$ )에 주어진 스트레스,  $b$ 는 시스템 내부( $\Omega$ )에 인가된 내력(body force)을 의미한다. 여기에 임의함수(arbitrary function), 혹은 가상함수(virtual function)인  $\delta$ 를 곱하게 되면  $\delta u$ 는 가상변위(virtual displacement)를 나타내며,  $\delta \epsilon$ 는 가상변위에 의한 가상 전단응력을 나타낸다. 즉, 식 (5)는 시스템 내부에 존재하는 내력을 포함하는 내부의 가상 에너지는 외부에서 인가된 가상 에너지와 그 크기가 같다는 의미로써, 가상함수를 도입하여 나타낸 식이다. 또한 식 (5)는 가상 변위 대신에 가상 속도 개념을 도입하여 식 (6)과 같이 나타낼 수도 있다. 식 (6)은 식(5)와 의미는 같으

나  $\dot{\epsilon}$ 은 시스템의 응력비(strain rate)를 나타내고,  $v$ 는 속도를 의미한다는 것이 차이점이다.

$$\int_{\Omega} \delta \dot{\epsilon} \cdot \sigma d\Omega = \int_{\Gamma} \delta v \cdot f d\Gamma + \int_{\Omega} \delta v \cdot b d\Omega \quad (6)$$

3차원 형상함수로 사용되는 구조는 대부분 육면체(cubic), 혹은 사면체(tetrahedron)이다. 따라서, 선형 형상함수인 경우, 각 꼭지점 노드 수가 요소의 노드 개수가 되므로 육면체는 8노드, 사면체는 4노드를 가진다. 일반적으로 해의 정확한 수렴을 위해서 선형 형상함수 이외에도 다차원 형상함수를 사용하여 요소 형태는 동일하지만 노드 수가 달라진다. 주어진 문제에 대하여 적합한 형상함수와 요소 형태를 선택함으로써, 효율과 정확성을 높일 수 있다. 본 산화 공정 시뮬레이션의 경우 경계가 이동하고 그 형태의 변화가 크므로, 육면체 형상함수에 비해 사면체 형상함수가 매우 유리할 뿐 아니라 선형 형상함수를 사용하더라도 정확히 해에 수렴할 수 있으므로, 사면체 형상함수를 선택하였다.

약정식으로 만들어진 확산 방정식을 이산화하면 식 (7)과 같이 벡터 형태의 형상 함수인  $\bar{N}^T$ 와 형상함수의 미분형인  $\bar{B}^T$  형태로 바꿀 수 있다. 따라서,

$$\begin{aligned} C &= \bar{N}^T \bar{C} \\ \bar{\nabla} C &= \bar{B}^T \bar{C} \\ \psi &= \bar{N}^T \bar{\psi} \\ \bar{\nabla} \psi &= \bar{B}^T \bar{\psi} \end{aligned} \quad (7)$$

으로 나타낼 수 있으며, 식 (7)을 초기의 약정식에 대입하여 전개하면,

$$\begin{aligned} \bar{\psi}^T \left( \int_{\Omega} \bar{B} \bar{D} \bar{B}^T d\Omega + \int_{\Gamma_c} \bar{N} k_s \bar{N}^T d\Gamma + \int_{\Gamma_n} \bar{N} h \bar{N}^T d\Gamma \right) \bar{C} \\ = \bar{\psi}^T \int_{\Gamma} \bar{N} h c^* d\Gamma \end{aligned} \quad (8)$$

와 같이 된다. 식 (8)에서 좌변의 괄호 안이 강성행렬  $\bar{K}_e$  이고, 우변의 적분 항이 요소 로드 벡터  $\bar{F}$ 이다. 또한,  $\bar{\psi}$ 가 임의의 함수이므로 최종적으로 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\bar{K}_e \bar{C} = \bar{F} \quad (9)$$

유동 방정식은 앞서 언급한 바와 같이 응력비와 스트레스 속도의 관계식으로 나타낼 수 있다. 또한, 응력비와 스트레스는 속도 성분을 이용하여 표현할 수 있으므로, 속도에 대한 이산화가 필요하다. 속도 벡터는

위치에 대한 함수이므로, 각 요소에서 임의의 좌표,  $(x, y, z)$ 에서의 속도는 식 (10)과 같이 각 노드의 속도로 구현할 수 있다.

$$u(x, y, z) = f(\vec{V}_0, \vec{V}_1, \dots, \vec{V}_{n-1}) \quad (10)$$

여기서,  $\vec{V}_i = [V_{x_i}, V_{y_i}, V_{z_i}]^T$ 이며  $i$ 번째 노드에서의  $x, y, z$ 방향의 속도를 나타내며,  $n$ 은 한 요소에서의 노드 개수를 나타낸다. 따라서 확산 방정식에서의 보간 함수와 같이 형상 함수를 이용하여, 속도를 표기할 수 있다.

$$u(x, y, z) = \sum_i N_i(x, y, z) V_i \quad (11)$$

스트레인은 변위에 대한 편미분 형태이고, 응력비는 속도에 대한 편미분 형태이므로 각각의 표현은 다음과 같다.

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \frac{\partial v_i}{\partial j}, \quad \dot{\gamma}_{ij} = \frac{\partial v_i}{\partial j} + \frac{\partial v_j}{\partial i} \quad (12)$$

여기서 응력비  $\dot{\epsilon}$ 를 직교 성분으로 분할하면,  $\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}' + \dot{\epsilon}''$ 로 쓸 수 있다.  $\dot{\epsilon}'$ 는 전단(shear) 성분이고,  $\dot{\epsilon}''$ 는 체적(volumetric) 성분으로써, 이렇게 두 가지 성분으로 분할하면 각각의 성분은 다음과 같이 스트레소로 표현이 가능하다.

$$\sigma' = DP\dot{\epsilon}', \quad \sigma'' = Q\dot{\epsilon}'' \quad (13)$$

이 식에서  $P$ 와  $Q$ 는 각각의 스칼라 미분 연산자(operator)이고,  $\sigma'$ 는 전단(shear),  $\sigma''$ 는 Hydrostatic 스트레소 벡터이다.  $\dot{\epsilon}'$ 와  $\dot{\epsilon}''$ 는 서로 직교(orthogonal)하므로,  $\dot{\epsilon}'$ 와  $\sigma''$ 는 직교하고,  $\dot{\epsilon}''$ 와  $\sigma'$ 도 직교하는 특성을 보인다. 위 식에서  $D$ 는 상수 행렬이다.

스트레인에서 직교 성분으로 나눈 것과 마찬가지로, 스트레소도 식 (14)와 같이 직교 성분으로 나눌 수 있다.

$$\sigma = \sigma' + \sigma'' \quad (14)$$

이는 앞서 설명한 관계,  $\sigma' = DP\dot{\epsilon}'$ ,  $\sigma'' = Q\dot{\epsilon}''$ 를 만족하며, 직교 특성(orthogonality)을 만족한다.  $\sigma'$ 은 순수한 전단 성분(pure shear stress)이고,  $\sigma''$ 는 Hydrostatic 스트레소 성분이다. 따라서 Hydrostatic

스트레소 성분인  $\sigma''$ 를 Hydrostatic 압력,  $p = -(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz})/3$ 를 이용하여 다음과 같이 표현된다.

$$\sigma'' = \begin{bmatrix} -p \\ -p \\ -p \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (15)$$

따라서,  $\sigma'$ 는

$$\sigma' = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} + p \\ \sigma_{yy} + p \\ \sigma_{zz} + p \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \end{bmatrix} \quad (16)$$

와 같이 표현될 수 있다. 앞에서 설명하였던 스트레소와 스트레인의 관계식은 미분 연산자(differential operator)를 포함하고 있는데, 이것을 다음과 같이 점성도(viscosity)  $\eta$ 와 상수  $\alpha$ 를 이용하여 근사식으로 나타낼 수 있다.

$$\sigma' = \eta D \dot{\epsilon}' \quad (17)$$

$$\sigma'' = \alpha \dot{\epsilon}'', \quad \alpha \gg \eta \quad (18)$$

여기서 상수  $\alpha$ 는 비압축성 조건을 만족시키기 위한 점성도 보다 매우 큰 값을 가지는 상수이다.

지금까지 요소 계산을 위해 지배 방정식을 약정식으로 변환시키고, 이산화 작업을 통해서 초기의 지배 방정식을 행렬의 적분 형태로 변환하였다. 이제 이러한 적분을 수치 해석적으로 풀면 각 요소의 강성행렬을 얻을 수 있다. 수치 해석적으로 적분을 수행하는 방법은 트레페조달 방법(Trapezoidal rule) 및 심슨 방법(Simson's rule), 가우시안 방법(Gaussian quadrature) 등 여러 가지가 있으며, 이 중 가우시안 방법이 가장 널리 쓰이고 있다. 본 논문에서는 기본 메쉬 요소로서 사면체를 사용하였고, 메쉬 요소의 각 면이 삼각형을 이루므로, 가우시안 방법보다 컴퓨터 코딩이 간편하고 정확성도 높은 방법인 체적 좌표계(volume or parametric coordinate system)를 이용하였다<sup>[7]</sup>. 각 요소에 대한 계산을 반복적으로 수행한 후, 최종적으로 각 요소에서 계산된 결과를 전체 행렬로 결합하여 강성행렬의 역행렬을 구함으로써 해를 구할 수 있다.

#### IV. 시뮬레이션 결과 및 고찰

그림 7에 도시한 것은 섬구조와 공구조의 산화막을 형성한 3차원 산화 시뮬레이션 결과로서, <100>방향의 실리콘에 1,000℃, 30분 동안 습식 산화를 진행한 후 질화막의 압력에 의한 영향을 비교한 그림이다. 시뮬레이션에 사용된 노드 수는 산화막 내부의 노드만 2200개이고, 이때 계산된 시간은 SUN Sparc2을 사용하여 270분이 소요되었다. 그림 7(a), (b)는 섬구조의 산화막 성장에 대하여 같은 시간 동안 산화를 진행한 후, 질화막의 압력에 의한 영향을 비교한 그림으로, 초기 산화막 두께는 300Å이다. 그림 7에서 프리즘 구조를 이용하여 수행되는 3차원 메시의 정련화 과정을 볼 수 있다. 그림에서 나타난 바와 같이 질화막의 영향을 무시하고, 즉 질화막의 두께가 얇아서 질화막의 압력이 산화에 영향을 미치지 않는 상황일 때, LOCOS의 형태가 상하 대칭적인 형태로 성장하여 산화막 상단에 변형이 없음을 볼 수 있었다. 이 때 성장한 산화막의 두께는 2,250Å으로 측정되었고, 새부리 길이는 2,010Å이었다. 그러나, 질화막 마스크의 압력을 산화막의 유동 방정식의 해석에 있어서 경계 조건으로 부여함으로써, 즉 마스크의 두께가 두꺼울 때는 그 무계에 의한 압력이 산화막의 형태에 영향을 주어, 그림 7(b)에 나타난 바와 같이 LOCOS 상단의 질화막 마스크 끝부분에서 LOCOS의 형태가 심하게 변형됨을 볼 수 있었다<sup>6)</sup>. 그림 8(c)는 공구조의 산화막 성장 시뮬레이션 결과로서, 마스크 압력의 영향이 나타나 있음을 볼 수 있다.

또한, 그림 8에서는 본 논문의 결과 3차원 프로파일 중 2차원으로 단면을 취하여 얻은 결과를 2차원 시뮬레이터인 SUPREM4의 계산 결과와 비교해 보았다. 그림8(a)는 SUPREM4의 2차원 결과를 도시한 그림이고, (b), (c), (d)는 본 개발 시뮬레이터의 3차원 결과를 단면으로 2차원화하여 도시한 그림이다. 같은 조건에서 그림 8(a)와 (b)는 동일한 결과를 얻었다. (c)와 (d)는 질화막 마스크의 영향에 대한 각 조건에서 3차원 산화 시뮬레이션 결과에 대한 단면 구조 및 확산에 의한 산화제의 분포를 도시하고 있다. 이 때의 조건은 그림 8의 조건과 같은 1,000℃, 30분 습식 산화이다. 습식 산화에서 기체 상태의 산화제들이 산화막으로 침투하는 크기는 분위기의 압력과 온도에 영향을 받는다. 산화막과 분위기 가스에서 산화제의 농도는 C\*로 나타내며, 1,000℃ 760torr에서 C\*값은  $3 \times 10^7 \mu\text{m}^{-3}$ 이다.

산화제는 산화막 표면의 C\*로부터 산화막/실리콘 계면으로 확산하면서 산화제의 농도는 그림과 같이 감소하게 된다. 그 결과 산화막/실리콘 계면에 도달한 산화제

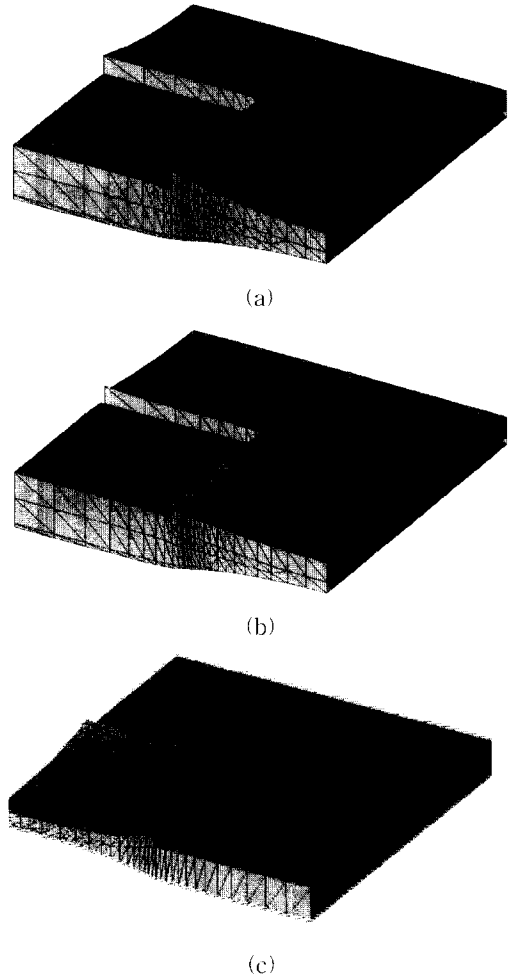


그림 7. 섬구조와 공구조의 산화막 성장 3차원 시뮬레이션 결과: (a) 질화막 마스크의 영향을 고려하지 않은 섬구조의 산화막 성장 시뮬레이션. (b) 질화막 마스크의 압력을 고려하여 산화막에 변형이 이루어진 섬구조의 시뮬레이션 결과. (c) 마스크의 압력을 고려한 공구조의 산화막 성장 시뮬레이션 결과

Fig. 7. Results of three-dimensional oxidation for island and hole structures: (a) Oxidation of island structure consider, not consider an effect of nitride mask. (b) Island structure, consider a pressure of nitride mask. (c) Hole structure, consider a pressure of nitride mask.



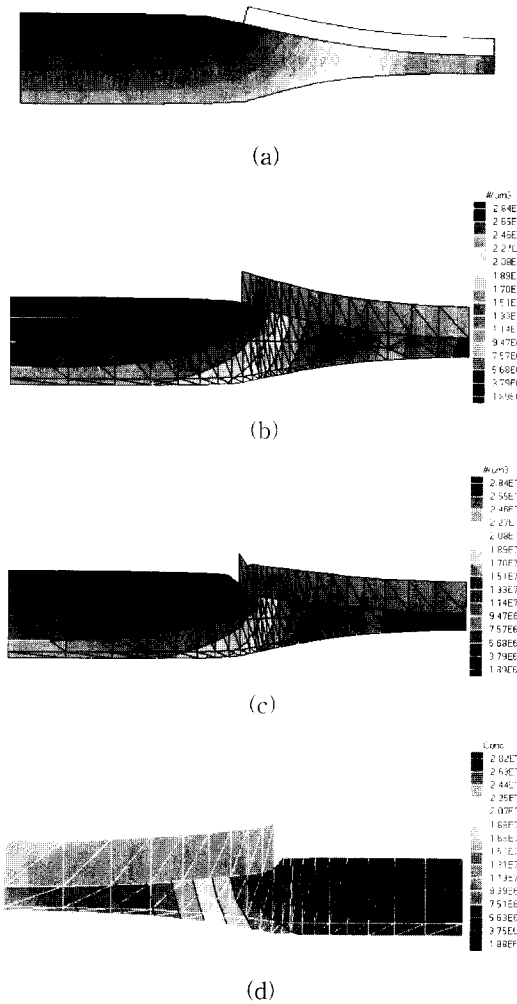


그림 8. 3차원 산화 시뮬레이션 결과에 대한 단면 구조에서 확산에 의한 산화막 내부의 산화제의 분포: (a) 2차원 시뮬레이터인 SUPREM4의 결과도. (b) 질화막 마스크의 영향을 고려하지 않은 섬구조의 산화막 성장 시뮬레이션. (c) 질화막 마스크의 압력을 고려하여 산화막에 변형이 이루어진 섬구조의 시뮬레이션 결과. (d) 마스크의 압력을 고려한 공구조의 산화막 성장 시뮬레이션 결과

Fig. 8. Cross section of three dimensional oxidation simulation for oxidant distributions in the oxide: (a) The result of 2D Simulator SUPREM4. (b) Oxidation of island structure without considering an effect of nitride mask. (c) Island structure considering a pressure of nitride mask. (d) Hole structure considering a pressure of nitride mask.

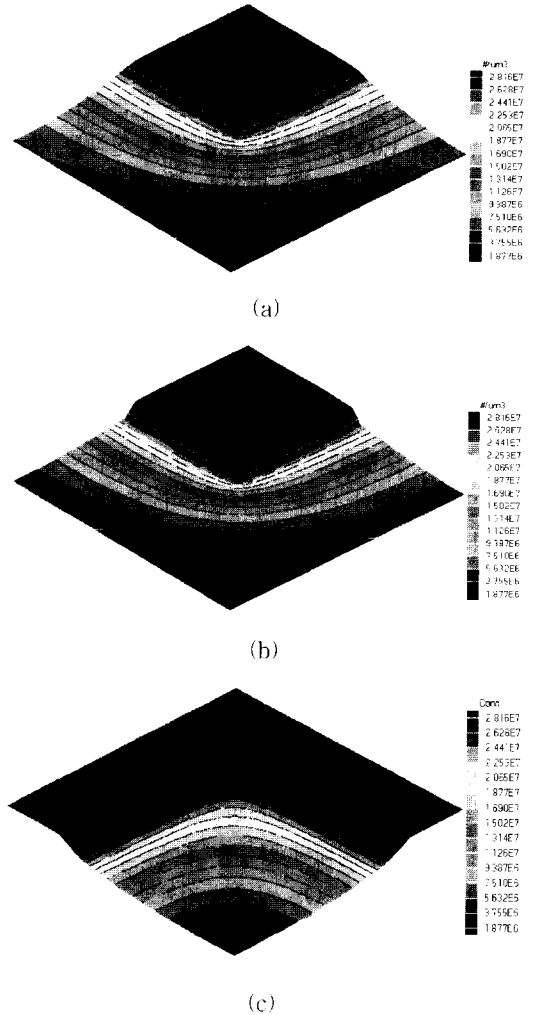


그림 9. 질화막 마스크 압력의 영향에 따라서 같은 시간 동안 산화막을 성장시켰을 때 질화막을 제거한 후 산화막의 위쪽 표면에서의 산화제의 분포: (a) 마스크의 영향을 고려하지 않은 섬구조 시뮬레이션 (b) 마스크 압력의 영향을 고려한 섬구조 시뮬레이션(산화제의 확산이 (a)에서 보다 더 많이 이루어졌음을 볼 수 있다.) (c) 마스크 압력의 영향을 고려한 공구조 시뮬레이션 결과

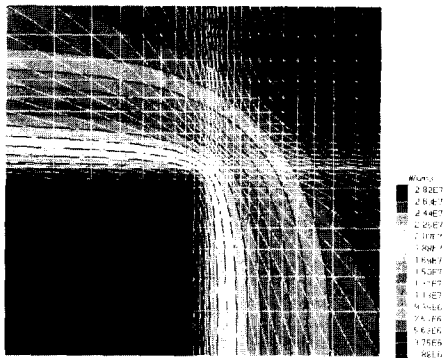
Fig. 9. Oxidant distributions on the oxide which show an effect of a pressure of nitride mask: (a) Simulation of island structure without considering a nitride mask effect. (b) Shows a appearance of a nitride mask effect for island structure. (c) Simulation of hole structure considering a nitride mask effect.

는 반응 계수  $K_0$  값에 비례( $F=K_0C$ )하여 실리콘과 반

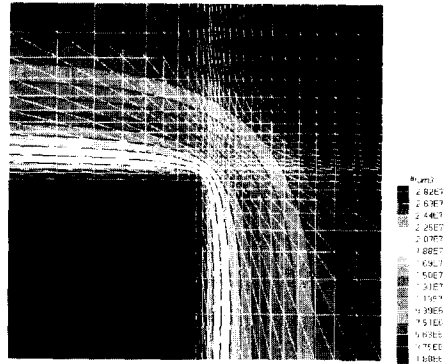
응함으로써 산화막을 형성하게 된다. 질화막의 압력이 큰 경우, 산화제의 확산이 질화막의 아래 부분에서 감소되므로 그림에 나타난 바와 같이, 질화막 마스크의 압력을 고려한 시뮬레이션에서는 LOCOS 형태의 변형이 심하게 발생하고, 또한 산화막 내부에서 산화제의 확산에 대한 분포를 살펴보면 산화제의 확산이 질화막 마스크의 영향을 고려하지 않은 결과보다 더 적게 이루어짐을 볼 수 있었다. 또한, 섬구조와 공구조의 산화막 성장에 대하여 마스크 코너 부근이 아닌 영역에 대한 2차원 단면 구조는 동일함을 알 수 있었다.

그림 9에서는 질화막 마스크 압력에 대한 영향으로 산화제의 확산이 더 적게 이루어짐을 비교하기 위하여 질화막 마스크를 제거한 후 산화막 상부에서 산화제의 분포를 나타낸 것이다. 섬구조의 산화막 성장을 위한 질화막 마스크의 모서리 부분은 그림에서 흰색의 선으로 표시되어 있다. 그림 9(a), (b)에 나타난 바와 같이 섬구조의 마스크 코너에서는 다른 영역에 비해 질화막 하부로 산화제의 공급이 적게 이루어지기 때문에, 산화제의 확산이 더 적게 이루어짐을 볼 수 있었고, 산화제의 확산이 질화막 마스크 압력의 영향을 고려하였을 때 더 적게 이루어짐을 볼 수 있었다. 반대로 공구조에서는 마스크 코너 영역으로 더 많은 산화제가 공급되므로, 그림 9(c)에 나타난 바와 같이 마스크 코너 영역에서 산화제의 확산이 더 많이 이루어짐을 확인할 수 있었다.

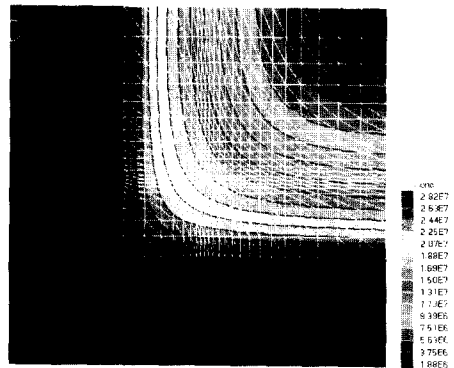
그림 10에 도시한 것은 앞의 그림에서 보인 산화제의 분포에 대하여 산화막 위에서 내려다 본 그림이다. 그림에서 메쉬가 나타나 있는 부분은 질화막 마스크를 표시한다. 섬구조를 나타낸 그림 10(a), (b)와 공구조를 나타내고 있는 그림 10(c)를 비교해 보면 그림 9에서 설명한 산화제의 분포를 비교하여 잘 볼 수 있다.



(a)



(b)



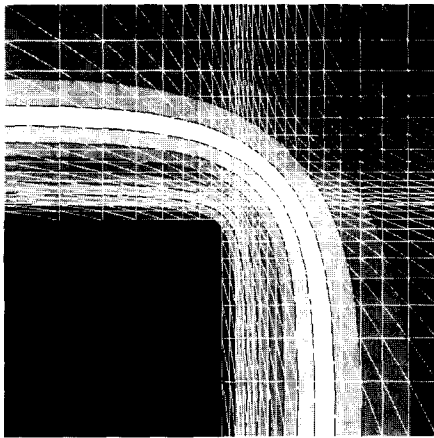
(c)

그림 10. 섬구조와 공구조의 3차원 산화 시뮬레이션 후 질화막 하부로 산화제의 확산 정도의 비교: (a) 질화막 마스크의 영향을 고려하지 않은 시뮬레이션(섬구조) (b) 질화막 마스크의 압력을 고려한 시뮬레이션(섬구조) (c) 질화막 마스크의 압력을 고려한 시뮬레이션(공구조) 결과로서, 섬구조에서는 마스크의 코너 부근에서 산화제의 양이 적음을 볼 수 있고, 공구조에서는 마스크의 코너 부근에서 산화제의 양이 더 많음을 볼 수 있다.

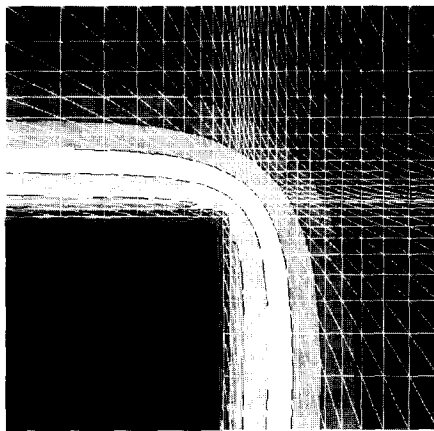
Fig. 10. Top-view of oxidant distribution of the oxide, that shows non-uniformity at the corner of the nitride mask: (a) Simulation of oxidation without considering nitride mask effect(Island structure). (b) Simulation of oxidation considering nitride mask effect(Island structure). (c) Simulation of oxidation considering nitride mask effect(Hole structure).

그림 11에 나타난 것은 질화막 하부로 새부리 모양 LOCOS의 침투 깊이를 비교하기 위한 그림으로써, 산화막의 위쪽 경계면의 3차원적인 형태를 알 수 있는 등고선을 나타내었다. 마스크가 없는 영역에서 산화막

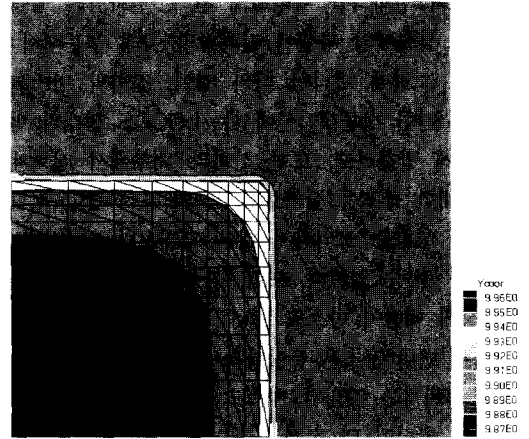
의 두께는 각 조건에서 모두 2,250Å이었다. 각 조건에서 질화막 하부로 LOCOS의 침투 길이를 비교하기 위하여, LOCOS의 새부리 길이를 마스크의 모서리에서부터 산화막의 두께가 노출된 영역 산화막 두께의 1/2이 되는 곳까지의 길이로 정의하였다. 그림 11(a)에 나타난 바와 같이 질화막의 두께가 얇아서 질화막의 압력이 산화에 영향을 미치지 않는 상황일 때, 마스크 코너에서 새부리 길이는 2,010Å이고, 마스크 모서리 영역에서는 1,360Å이었다. 질화막 마스크의 압력을 영향을 미치는 그림 11(b)의 결과에서 새부리 길이는 마스크 코너에서 1,640Å이었고, 마스크 모서리 영역에서는 738Å이었다. 또한, 그림 11(c)에 나타난 공구조에 대한 결과에서는 앞서 설명한 바와 같이 마스크의 코너 영역으로 새부리의 침투가 더 많이 이루어짐을 확인할 수 있었다.



(a)



(b)



(c)

그림 11. 3차원 산화 시뮬레이션 후 질화막 하부로 LOCOS의 새부리 모양 침투 길이 비교: (a) 섬구조에서 질화막 마스크의 영향을 고려하지 않은 시뮬레이션, (b) 섬구조에서 질화막 마스크의 압력을 고려한 시뮬레이션, (c) 공구조에서 질화막 마스크의 압력을 고려한 시뮬레이션 결과로서 마스크 압력을 고려하였을 때 새부리 모양이 더 적게 침투함을 볼 수 있고, 섬구조에서 마스크 코너 영역으로 침투 길이가 더 작게 이루어지고, 공구조에서는 마스크 코너 영역으로 새부리 모양의 침투 길이가 더 많이 이루어짐을 볼 수 있다.

Fig. 11. Bird's beak length of LOCOS under the nitride mask, that show difference of the bird's beak length at the corner of a nitride mask: (a) Without considering a nitride mask effect(Island structure). (b) Considering a nitride mask effect(Island structure). (c) Considering a nitride mask effect (Hole structure).

### V. 결 론

본 논문에서는 0.1 $\mu$ m의 최소 선폭을 갖는 차세대 반도체 소자의 개발에 있어서 핵심 단위 공정인 열산화 공정을 사용한 산화막 성장을 정확하게 해석하기 위하여, 질화막 마스크의 형태와 질화막 마스크의 압력에 대하여 변화하는 마스크 코너 부근에서의 3차원적인 산화막 형상을 시뮬레이션할 수 있는 3차원 산화 시뮬레이터 개발에 대하여 설명하였다. 또한, 개발된 3차원 산화 시뮬레이터의 시뮬레이션 결과를 이용하여 산화

막 성장에 있어서 나타나는 3차원적인 효과를 설명하였다. 개발된 3차원 산화 시뮬레이터는 열산화 공정을 이용한 차세대 반도체 신 단위 공정의 개발에 적용할 수 있도록 하기 위하여 해석적인 모델을 사용하지 않고, 물리적인 모델을 바탕으로 한 수치해석 방법인 유한요소법을 적용하였고, 시뮬레이션 과정에서 발생하는 수치해석적인 오차의 감소를 위하여 3차원 적응 메쉬 생성기도 함께 개발하였다. 개발된 3차원 산화 시뮬레이터는 LOCOS 형상의 3차원적 효과를 설명할 수 있었으며, 향후 실험치를 이용한 파라미터 보정의 단계를 거쳐 1GB급 이상의 차세대 반도체 메모리 소자의 격리 기술 개발에 적용할 수 있으리라 사료된다.

#### 참 고 문 헌

- [1] H. Umimoto et. al., "Three-dimensional numerical simulation of local oxidation," IEEE Trans. on Electron Devices, vol. ED-38, no. 3, pp. 505-511, March 1991.
- [2] A. Poncet, "Finite-element simulation of local oxidation of silicon," IEEE Trans. Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems, vol. 4, no. 1, pp. 41-53, Jan. 1985.
- [3] S. Bozek, B. Baccus, V. Senez and Z.Z. Wang, "Mesh Generation for 3D Process Simulation and the Moving Boundary Problem," H. Ryssel, P. Pichler, *Simulation of Semiconductor Devices and Processes*, vol. 6, Springer-Verlag Wien New York, pp. 460-463, 1995.
- [4] D.D. Yang, "Mesh Generation and Information Model for Device Simulation," Ph.D. Thesis, Dept. of Electrical Engineering, Stanford University, June 1994.
- [5] K.H. Huebner, *The Finite Element Method for Engineers*, 3rd ed., Wiley, 1995.
- [6] D. Chin, S. Oh, S. Hu, R. Dutton, J. Moll, "Two-Dimensional Oxidation," IEEE Trans. on Electron Devices, vol. ED-30, no. 7, pp. 744-749, Jul., 1983.
- [7] O.C. Zienkiewicz and R.L. Taylor, *The Finite Element Method*, 4th ed., Vol. 1, McGraw Hill, 1989.

저 자 소 개



李濟熙(正會員)

1968년 10월 5일생. 1992년 인하대학교 응용물리학과(공학사). 1994년 인하대학교 전자재료공학과(공학석사). 1994년 ~ 현재 인하대학교 전자재료공학과 박사과정. 주관심분야는 반도체 소자 및 공정, 시뮬레이션 등

임.



尹相鎬(正會員)

1969년 11월 20일생. 1995년 인하대학교 전자재료공학과(공학사). 1995년 ~ 현재 인하대학교 전자재료공학과 석사과정. 주관심분야는 반도체 공정 물리, 시뮬레이션 등임.

宋在福(正會員)

1972년 11월 7일생. 1995년 인하대학교 전자재료공학과(공학사). 1995년 ~ 현재 인하대학교 전자재료공학과 석사과정. 주관심분야는 반도체 공정 시뮬레이션 등임.



金演泰(正會員)

1970년 4월 16일생. 1994년 인하대학교 전자공학과(공학사). 1994년 ~ 1996년 인하대학교 전자재료공학과(공학석사). 1996년 ~ 현재 전자재료공학과 박사과정. 주관심분야는 반도체 공정, 시뮬레이션 등임.



元太映(正會員)

1959년 2월 21일생. 1981년 서울대학교 전자공학과(공학사). 1983년 한국과학기술원 전기 및 전자공학과(공학석사). 1989년 미국 University of Illinois at Urbana-Champaign 전자공학과(공학박사). 1989년 ~ 1990

년 미국 State University of New York 조교수. 1990년 ~ 1991년 삼성전자(주) 수석 연구원. 1991년 ~ 현재 인하대학교 공과대학 전자전기컴퓨터공학부 부교수. 주관심분야는 반도체 소자 및 공정 등임.