

강유전체 PZT박막을 이용한 MFMS소자의 모델링 및 특성에 관한 시뮬레이션 연구

Computer Modeling and Characteristics of MFMS devices Using Ferroelectric PZT Thin Film

국상호*, 박지은*, 문병무**

Sang-Ho Kook*, Ji-On Park*, Byung-Moo Moon**

Abstract

This paper describes the structure modeling and operation characteristics of MFMS(metal-ferroelectric-metal-insulator-semiconductor) device using the Tsuprem4 which is a semiconductor device tool by Avanti.

MFMS device is being studied for nonvolatile memory application at various semiconductor laboratory, but it is difficult to fabricate and analyze MFMS devices using the semiconductor simulation tool : Tsuprem4, medici, and etc. So the new library and new materials parameters for adjusting ferroelectric material and platinum electrodes in the tools are studied. In this paper, structural model and operation characteristic of MFMS devices are measured, which can be easily adopted to analysis of MFMS device for nonvolatile memory device application.

Key Words(중요용어) : 강유전체, Tsuprem4, NDRO(Non-Destructive Read Out), 메모리 소자, 비휘발성(Non-volatile), 잔류 분극, 소자 모델링, PZT($PbZr_xTi_{1-x}O_3$), Pt electrode, MFMS(Metal-Ferroelectric-Metal-Insulator-Semiconductor)

1. 서 론

오늘날 멀티미디어와 정보 통신의 급속한 발전은 하드웨어 분야에 대한 다양한 성능 개선을 요구하게 되었다.

그 중 메모리 분야에 있어서는, 대용량의 데이터 처리 및 정보의 송수신에 필요한 고속, 고용량 메모리를 필요로 하게 되었다. 그러나 기존의 DRAM의 경우, Cell의 집적화에 따른 커패시터 용량의 적절한 확보와 커패시터의 누설 전류에 의한 재충전(Refresh) 과정에 필요한 전력 손실 및 데이터의 휘발성(Volatile) 문제로 인해 차세대 메모리 소자로서의 역할에 미흡한 실정이다.

현재 이러한 문제점의 보완책으로 다양한 메모리소자들이 연구되어 지고 있으나, 그 중 강유전체의 잔류 분극 특성을 이용한 메모리(Ferroelectric Random Access Memory, FRAM) 소자에 대한 개발이 활발히 진행중이다.^[1] FRAM은 DRAM과는 달리 ROM과 같은 데이터의 비휘발성특성(Nonvolatile)을 지니고, 특히 FET구조를 가지는 경우 데이터의 읽기 과정에서 발생하는 정보의 파괴(DRO)를 방지한다는 점에서 많은 각광을 받고 있다. 또한 flash memory와는 달리 읽기/쓰기 과정이 빠르고 데이터의 정보처리과정에 따른 저전력 소모는 차세대 이동통신분야에 많은 응용을 기대하리라 본다.^[2]

그러나 이러한 FRAM 소자의 장점에도 불구하고, 기존의 반도체 메모리 공정을 통한 강유전체 박막의 제작 및 상용화된 시뮬레이션툴을 이용한 FRAM 소자의 특성 분석에 관한 연구는 아직 미미한 수준에 그치고 있다.^[3]

따라서, FRAM이 기술적인 측면을 비롯하여, 시장성에 있어 경쟁력을 지니기 위해서는 기존의 반도체 공정기술의 적

* : 고려대학교 전기·전자·전파공학과 석사과정
** : 고려대학교 전기·전자·전파공학과 부교수
(서울 성북구 안암 5가 1번지 Fax : 921-0544
E-mail : jionpark@elec.korea.ac.kr
1999년 12월 6일 접수, 2000년 2월 17일 심사완료

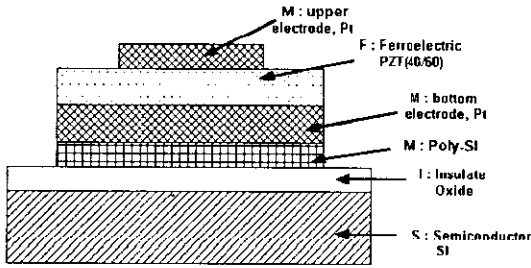


그림 1. MFMIS 소자의 개략도
Fig. 1. Schematic of MFMIS device

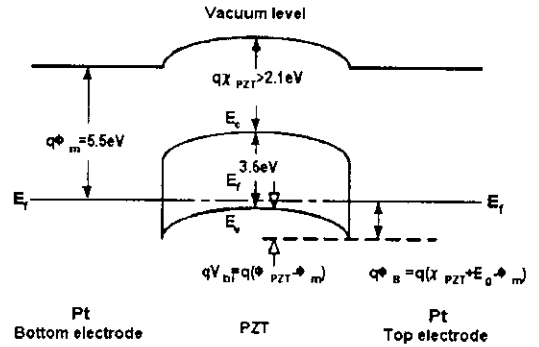


그림 2. Pt/PZT/Pt 에너지 밴드 다이어그램
Fig. 2. Energy band diagram of Pt/PZT/Pt structure

용은 물론 소자 제작 및 특성 분석에 관한 일반화된 시뮬레이션툴의 개발이 가장 큰 선결 과제라 할 수 있다. 이러한 관점에서 볼 때, 기존의 반도체 소자들의 프로세싱과 특성 분석에 사용되어지는 시뮬레이션툴(Tsuprem4)을 사용하여, FRAM 소자의 모델링과 특성 분석에 적합한 함수들을 일반화 할 경우, 보다 정확하고 현실성 있는 소자 개발을 이룰 수 있으리라 사료된다. 일반 프로그래밍 언어(c-language, fortran)를 이용하여 강유전체 특성에 대한 많은 시뮬레이션이 이루어져 왔으나¹⁾, 실제 상용화된 시뮬레이션툴을 이용한 FRAM 소자의 특성 분석은 거의 전무하다 할 수 있다.

Tsuprem4를 이용한 FRAM 소자의 모델링에는 타 연구기관(RICOH Co. LTD)에서 실험한 MFMIS (Metal-Ferroelectric-Metal-Insulator-Semiconductor)구조를 기본으로 선택하였으며, 실험결과와 실제 시뮬레이션으로 구현한 소자의 모델링 및 전기적 특성에 대한 상호 비교를 시행하였다. MFMIS소자는 강유전체 PZT를 이용한 gate 구조 제작 시 결정 격자의 불일치나 Pb이온의 확산 억제에 위한 절연층이 삽입되어 다른 강유전체를 이용한 메모리 소자 MFS, All-perovskite 등에 비해 소자 특성을 보다 안정적으로 개선한 구조이다.¹⁾

본 논문에서는 먼저 MFMIS소자의 수학적 모델링 분석을 통해 PZT박막 및 강유전체 물질의 전극으로 사용되는 Pt 전극에 대한 각종 파라미터를 설정하고, 이를 토대로 소자의 모델링을 시행하였으며, 그에 따른 전기적 특성을 관찰하였다.

2. 실험 방법

2.1 수학적 모델링

이번 장에서는 시뮬레이션에 필요한 $PbZr_{1-x}Ti_xO_3$ ($x=0.4$, PZT(40/60))의 일함수, 전자 친화력등의 파라미

표 1. 시뮬레이션에 적용한 PZT, Pt 파라미터
Table 1. Parameter of PZT and Pt applied in simulation

	PZT	Pt electrode
밀도	7.49	21.44
원자수	27.472	78
원자 무게	81.4066	195.09
물 중량	325.6264	195.09
전도도	semiconductor	conductor
유전 상수	400	
에너지 밴드 갭	3.6eV	
전자 친화도	$\geq 2.1eV$	
일함수	$\geq 5.5eV$	5.5eV
불순물 농도	$1 \times 10^{18}/cm^3$	
가전자대 상태 밀도	$5 \times 10^{19}/cm^3$	
페르미 준위	0.1eV	
진성 캐리어 농도	$3.5 \times 10^{11}/cm^3$	

터 설정과 인가 전계에 따른 유전율의 변화, 그리고 포아송 방정식 및 전류의 연속 방정식의 재 설정에 주안점을 두고 연구하였다.

MFMIS FET의 모델링에 앞서 강유전체 PZT(40/60)의 등가 해석을 시행하였다.

먼저, PZT박막의 잔류 분극현상을 무시하고, 에너지 밴드 갭이 매우 큰 p-type 반도체로 가정하였다.⁶⁾ 이 경우, 일반 반도체 재료와 동일하게 페르미 준위, 전자 친화도, 일함수, 가전자대 상태 밀도, 그리고 역셉터 준위 등을 구할 수 있다.

그런 다음으로 강유전체의 잔류 분극 상태는 전기적 특성 측정시 강유전체 박막 내에 존재하는 고정된 정공/전자 농도로 등가 해석하였다.

먼저, PZT와 Pt에 대한 원자 수, 원자량, 몰 중량 등의 물질 구조에 대한 factors는 표1에 나타내었다.

PZT(40/60)의 일함수 및 전자 친화력을 구하기 위해 초기 조건으로 에너지 밴드 갭 $E_g=3.6\text{eV}$, 유전 상수=400, $N_A=1 \times 10^{18}/\text{cm}^3$, 페르미 레벨(E_f)= 0.1eV 으로 설정하였다.^[6] PZT의 일함수는 Pt 전극에 비해 큰 값으로 설정하였다.

위의 가정과 다른 경우, PZT쪽에 최소한 1000A/cm²이상의 과전류가 Pt/PZT 경계에 흐르는 계산이 나오게 된다. 반면 PZT의 일 함수와, 도핑 농도를 모두 낮게 설정할 수 있으나, 이 경우, 초기 조건을 만족시키기 위해서는 $1 \times 10^{15}/\text{cm}^3$ 이하의 농도를 지니므로, 사실상 현실적이지 못한 결론이 나온다. 결국, PZT의 전자 친화도(x)는 2.1eV이상을 지녀야 한다는 결론이 된다. 또한 초기 캐리어 농도(n_i)는 PZT와 유사한 특성을 지닌 BaTiO₃의 N_i 를 통해 구할 수 있다. 다시 말해서, PZT의 $N_i \approx N_c$ 로 가정할 경우,

$$p N_A = N_v \exp\left(\frac{E_v - E_f}{kT}\right)$$

$$\therefore E_f - E_v = kT \ln\left(\frac{N_v}{N_A}\right) \quad (1)$$

$$\therefore n_i = \sqrt{N_c N_v} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right)$$

$$N_v \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right) \quad (2)$$

$$= 3.5 \times 10^{-11} / \text{cm}^3$$

식(2)에서 구한 진성 캐리어 농도는 기존의 반도체 물질(Si)과 비교할 때, 매우 낮음을 알 수 있다. 결국, PZT 박막의 경우, 절연체 특성이 매우 큰 p-type 반도체로의 가정은 성립된다. 또한 강유전체의 유전상수는 일반 반도체 물질과는 달리 인가 전계의 크기에 따른 비선형적인 증가를 이루게 된다. 이때 대다수 분역에서의 분극 스위칭은 항전계에서 발생하므로, 항전계 근처에서의 유전상수는 매우 큰 값을 갖는 반면, 그 외의 값에서는 매우 낮음을 알 수 있다.

$$\epsilon(E) = \epsilon_s + (\epsilon_m - \epsilon_s) - \frac{1}{1 + \left[\frac{E \pm E_c}{E_0}\right]^2} \quad (3)$$

ϵ_s : 포화 유전율, ϵ_m : 최대 유전율, E_c : 항전계
 E_0 : 정규화된 전계, \pm : 초기 분극 상태에 의존

결국, 식(3)과 같이 항전계에 따른 유전상수의 변화 식을 유도해 낼 수 있다. 그리고 포아송 방정식 및 전류의 연속 방정식의 경우, 강유전체의 특성상 자유 캐리어는 존재하지 않으며, 속박 전하 즉 여기서는 불순물 도핑 양에 의한 전하들에 의한 메커니즘이 주류를 이루게 된다.

2.2 MFMIS 소자 제작 시뮬레이션

본 논문에서는 기본 LDD n-channel MOS구조를 표준으로 한 MFMIS소자를 제작하였으며, 그에 따른 흐름도는 그림 3과 같다.

PZT, Pt박막의 구조와 관련된 factors 설정은 앞서 표 1에 나타낸 바와 같으며, PZT-gate 구조의 patterning에 필요한 MASK library에서는 poly-Si, PZT, bottom electrode Pt, Contact window에 대하여 각각 0.65 μm , 0.45 μm , 0.5 μm , 1.95 μm 의 너비를 지니도록 프로그래밍 하였다.

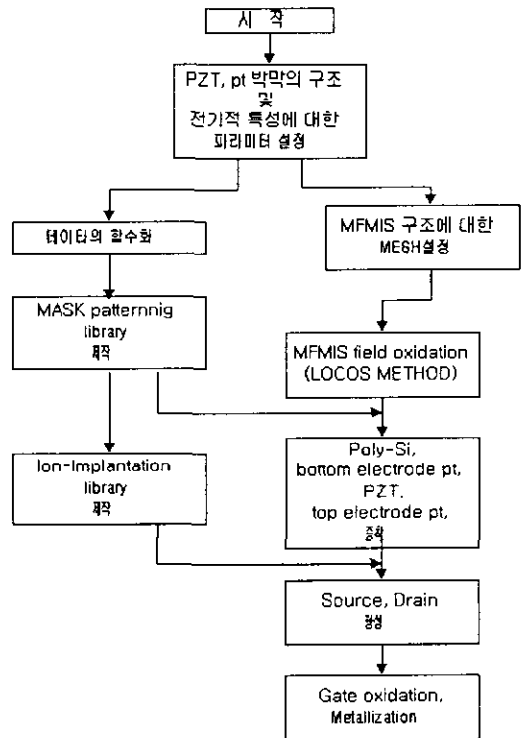


그림 3. MFMIS 소자의 제작 흐름도
 Fig. 3. Flowchart of MFMIS device fabrication

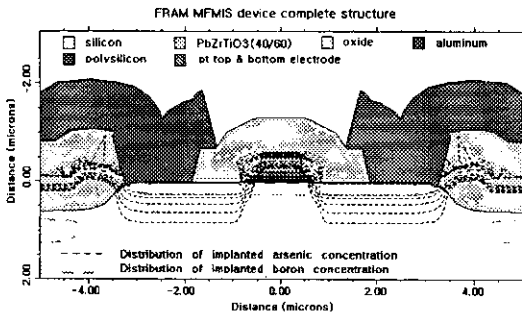


그림 4. MFISM소자의 단면도
Fig. 4. 단면도 of MFISM device

표 2. MFISM소자의 구조
Table 2. Structure of MFISM device

***** Structure Information *****

Layer	Material	Thickness	Dipty	Top	Bottom
7	Oxide	0.700		-1.3043	-0.6043
6	Pt	0.100		-0.6043	-0.5043
5	PZT	0.300	P	-0.5043	-0.2043
4	Pt	0.100		-0.2043	-0.1043
3	Poly-Si	0.0800	N	-0.1043	-0.0243
2	Oxide	0.0418		-0.0243	0.0175
1	Silicon	1.9825	P	0.0175	2.000

또한 self array에 따른 source, drain영역 제작시 필요한 PZT, Pt박막의 불순물 As이온에 대한 불순물 implant는 gaussian 분포 함수에 특성에 따르도록 이온 주입 특성을 함수를 재 설정하여 프로그래밍 하였다.

Oxide막의 성장은 1000℃ 에서 30min 시행하여 0.7μm 성장시켰으며, poly-Si는 0.08μm 성장시켰다. top and bottom Pt electrode는 0.1μm로 증착하였으며, PZT 박막의 경우, 0.3μm의 두께로 증착하였으며, source와 drain 영역은 As이온을 50eV, 5×10¹³/cm²의 조건으로 implant시켰다. 그 후 어닐링 단계로는 950℃에서 15min간 시행하였다.

공정 시뮬레이션의 정확도를 높이기 위해 PZT박막과 Pt 전극사이의 reaction에 대한 method를따로 설정하였다. 이때 Pt 전극과 poly-Si사이의 reaction관계는 시뮬레이션의 시간관계상 생략하였다.

그림 4에서는 그림 3에 따라 Tsuprem4로 제작한 n-channel MFISM소자의 단면을 나타낸 결과이다.

또한 표2에 위의 n-channel MFISM소자의 structure

information을 나타내었다. 여기서 thickness의 단위는 (μm) 이고, Dipty는 diffusion type을 의미하며, Top과 Bottom은 그림 4의 y축에서 나타내듯이 기준점 0.00에서 각 layer들의 최상단과 최하단의 위치를 (μm) 단위로 나타낸 것이다.

2.3 MFISM 소자의 전기적 특성 시뮬레이션

본 논문에서 제작한 MFISM소자의 전기적 특성을 고찰하는데 있어, 새로이 설정한 PZT, Pt 물질의 특성 함수의 다른 프로그램과의 호환성 문제로 인하여 틀에서 지원하는 기본적인 gate 인가 전압에 따른 drain 전류, 잔류 분극의 극성에 따른 threshold voltage 그리고 C-V 특성에 의한 메모리 윈도우를 측정하였다. 보다 정확한 소자의 동작 특성 분석을 위한 medic등의 응용에 필요한 호환성 문제에 대해서는 더 많은 연구가 진행 중에 있다.

그림 5는 위에서 제작한 MFISM 소자의 gate 인가 전압에 따른 drain 전류를 관찰하여 소자의 threshold voltage를 측정하였다.

이 때, 소자의 채널 길이는 1.12936μm로 측정되었다. PZT 박막에 대한 분극 특성을 고려하지 않은 경우, threshold voltage는 1.190V로 측정되었으며, 이는 일반 MOS가 지나는 threshold voltage 0.7V에 비해, MFM capacitor에 따른 gate 구조의 저항 증가로 간주할 수 있다. 그 후 positive, negative 잔류 분극 극성에 따른 threshold voltage는 각각 -0.788V, 2.5V로 측정되었다.

잔류 분극에 따른 C-V 특성고찰을 위해, MFISM 소자의 잔류 분극은 ±20μC/cm을 나타내도록 하였으며, 이에 대한 등가 해석은 PZT 박막 내에 존재하는 고정된 정공 농도로 등가 해석하였으며, 타연구 기관(RICOH Co. LTD)에서 유

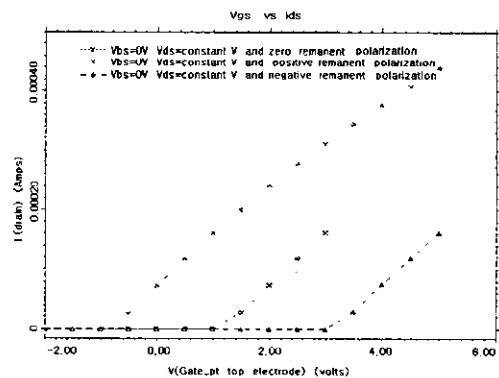
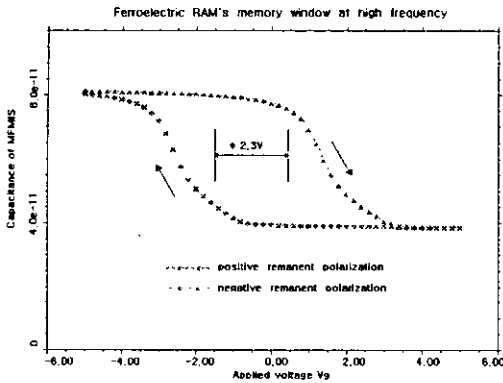
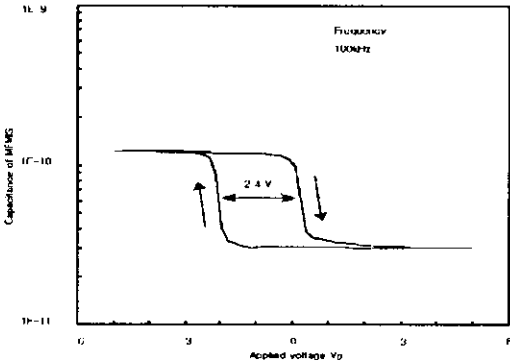


그림 5. Ids vs Vgs 특성 곡선
Fig. 5. Ids vs Vgs



(a)



(b)

그림 6. MFMS 소자의 잔류 분극의 극성에 따른 인가 전압에 대한 고주파 C-V특성 곡선

(a) : 시뮬레이션에 결과에 대한 C-V 곡선

(b) : 실험데이터 결과에 대한 C-V 곡선^[5]

Fig. 6. Dependence of high-frequency C-V characteristic of MFMS device on applied voltage

(a) : C-V characteristic of simulation result

(b) : C-V characteristic of experimental result^[5]

사 구조(Pt/PZT/Pt-Rh)에 대해 실험한 C-V 데이터와의 비교를 통해 $\pm 1 \times 10^{12}$ holes/cm²로 측정되었다.^[5]

측정된 MFMS 소자의 C-V특성 곡선에서 커패시터 값의 변화량은 초기 게이트 전압의 극성에 좌우됨을 알 수 있다. 시뮬레이션을 통한 C-V 곡선에서는 대략 0.5V, -1.8V에서 급격한 커패시터 값의 하강 및 상승을 이루고 있음을 알 수 있다. 반면에 실험 데이터에 의한 소자 특성에서는 0.4V, -2.0V에서 급격한 커패시터 값의 변화를 관측할 수 있다.^[5] 여기서 발생된 오차는 실제 실험에서 발생한 잔류 분극의 특

성과 시뮬레이션에서의 등가 해석한 고정된 정공 농도의 해석 차이 및 실험에서 사용된 하부 전극(Pt-Rh)에서 Rh물질의 무시에 따른 물리적 특성의 변화를 시뮬레이션에서 포함하지 않은 결과로 간주 할 수 있다. 시뮬레이션을 통해 측정된 메모리 윈도우의 크기는 2.3V이며, 이는 실험 데이터와 비교해 볼 때 -0.1V의 차이가 발생하였다.

메모리 소자로의 응용에 대해 동일한 gate 인가 전압 -0.8V근처에서 서로 다른 커패시터 값의 측정은 이전에 인가된 게이트 전압에 의존하는 강유전체의 잔류 분극 특성에 따른 것으로, MFMS소자의 메모리 응용에 따른 이진수 데이터를 처리하는데 적절하며, 그에 따른 NDRO 읽기 방식의 활용에 적용에 가능성을 알 수 있다.

3. 결론

본 연구에서는 강유전체 메모리 응용에 필요한 소자의 모델링 및 동작 특성에 관한 시뮬레이션을 시행하였으며, 기존 모델로 사용한 MFMS 소자에 대해서는 기존에 RICOH Co. LTD에서 실험한 MFMS소자의 구조를 기본으로 하였다.

현재 많이 상용화된 반도체 시뮬레이션툴(Tsuprem4)을 이용하여, MFMS소자의 특성 분석을 위해 먼저, 강유전체 PZT(40/60), Pt에 대한 구조 및 전기적 특성 파라미터에 관한 함수를 제작하였다. PZT와 Pt에 대한 원자 수, 원자량, 물 중량, 유전 상수등이 구조 파라미터 함수에 포함되며, 전기적 특성 해석을 위해 PZT는 밴드갭이 매우 큰 P-type 반도체로 해석하였으며, 그에 따른 일 함수와 전자 친화력, 가전자대 상대 밀도 값 등을 설정하였다.

또한, MFMS소자의 patterning에 필요한 MASK 함수 및 source/srain영역 형성을 위한 불순물 이온의 이온주입에 따른 PZT, Pt 박막에서의 불순물 arsenic과의 상관관계에 따른 이온 주입 함수를 제작하였다.

본 논문에서 모델링된 MFMS 소자의 경우 sub- μ m에서 발생할 수 있는 short channel effect와 shallow channel effect등의 기생효과를 무시하기 위해 소자의 채널 길이를 1.12936 μ m로 모델링하였다.

V-I 특성 곡선 분석을 통해 나타난 Threshold voltage는 잔류 분극이 $\pm 20\mu$ C/cm²에 대하여 각각 -0.788V, 2.5V로 측정되었다. 또한 고주파수에서의 C-V특성곡선에서는 0.5V와 -1.8V에서 커패시터 값의 급격한 변화를 나타내고 있으며, 이에 따른 메모리 윈도우는 대략 2.3V로 나타났다. 따라서 -0.8V 근처에서의 동일한 게이트 전압에 따른 커패시터의 두 가지 값의 변화를 이용하여 데이터의 이진수 처리를

가능하게 할 수 있으며, 그에 따른 NDRO 읽기 방식의 메모리 소자로의 활용에 적용이 가능하리라 사료된다.

앞으로 MFMS 소자의 특성 분석에 필요한 함수들의 호환성 문제를 개선하여, 다른 시뮬레이션툴에서의 해석을 통해 비휘발성 메모리 소자의 개발에 보다 정확하고, 유용한 데이터로 사용되었으면 한다.

참 고 문 헌

- [1] 김동철, 박봉태, 고중혁, 문병무, "PZT 박막 커패시터의 2차 고조파 전류특성", 전기전자재료학회논문지, 11권, pp.596-600, 1998.8
- [2] 유병곤, 유종선, 이원재, 김보우, "강유전체 메모리 기술 현황 및 전망", 전자공학회지 25권, pp. 715-722, 1998.7
- [3] William L.Warren, Duane Dimos, and Rainer M.Waser, "Degradation Mechanism in ferroelectric and high-permittivity perovskites", MRS BULLETIN, pp.40-45, July, 1996
- [4] 신상훈, "1-T형 비휘발성 메모리의 강유전체와 반도체화의 상호 연계에 대한 연구", 석사 학위 논문, 재료공학과, 한국과학기술원, 1997
- [5] Tishiyuki KAWASAKI, Yoshikazu AKIYAMA, Shunsuke FUJITA, and Shiro SATOH, "MFMS structure for nonvolatile ferroelectric memory using PZT thin film", IEICE trans electron, vol.E81, No.4, April, 1998
- [6] Sungehui LEE, "Characterization of lead zirconate-titanate(PZT) thin films for ferroelectric memory applications", the university of Arizona, 1993
- [7] J.F.Scott, F.M.Ross, C.A.Paz de Araujo, M.C.Scott, and M.Huffman, "Structure and device characteristics of SrBi2Ta2O9-based nonvolatile random-access memories", MRS BULLETIN, pp. 33-39, July 1996