

論文2000-37SD-12-4

반도체 기판 위의 3차원 구조에 대한 형상 진화 모델링 연구 (Modeling for Evolution of a 3-dimensional Structure on Semiconductor Substrate)

鄭賢洙*, 元太映*

(Hyun-Su Jung and Tae-Young Won)

요 약

본 논문에서는 레벨셋 방법을 이용한 표면 전진기를 사용하여 반도체 공정에서 3차원 증착 프로파일을 계산하는 방법을 보고한다. 레벨셋 방법을 이용하여 효율적으로 표면의 전진, 후퇴를 모델링 하기 위하여 반복법에 의한 초기화 방법을 새로이 개발하였다. 또한, 각각의 위치에서의 증착 및 식각률을 계산하기 위하여 소스에서 표면까지의 가시도 계산 방법과 표면 반사 모델을 개발하였다. 3차원 표면 전진기로 그림자 효과와 표면 반사가 고려된 계산을 수행하였다. 흡착 계수가 1인 경우와 0.3인 경우를 비교하여 반사, 스퍼터링에 의한 증착 프로파일의 변화를 비교하였다. 그리고 종횡비에 따른 증착물의 차이를 그림자 효과에 의한 가시각의 차이로 비교하였다.

Abstract

This paper reports a new calculation method of three dimensional deposition rate by level set method. To model an advancement of the surface efficiently, we have developed a new iteration method to re-initialize the level set function. For calculating etching and deposition rate by direct flow, we have developed a visibility test module and a refraction and re-sputtering model. Sputter deposition rate with shadow effect and surface refraction is calculated. We report that difference of profiles in cases that sticking coefficient are 1.0 and 0.3. We report that the difference of the deposition rate on bottom of the hole is caused by a difference of visible angle by the shadowing effect.

I. 서 론

반도체 공정에 적용되는 최소 선폭이 서브 마이크로로 감소함에 따라 기판상의 각 활성 소자를 연결 시켜 주기 위해 사용되는 금속과 층간 절연막의 수가 증가하고 있다. 또한, 여러층의 금속 도선과 각각의 소자를 연결하는 콘택홀의 종횡비가 증가하게 되어 콘택홀

에 균일한 절연막을 증착하고 금속으로 채우기 위한 공정의 개발이 중요해 졌다.

전술한 높은 종횡비를 갖는 콘택홀에 대한 증착 공정에서는 그림자 효과에 의하여 증착 형상이 입사 입자의 각도, 에너지 분포에 대하여 높은 민감도로 가지므로 이를 해석하여 정확한 결과를 얻는데 막대한 시간이 소요된다. 따라서, 공정 개발 비용을 절약하고 공정 개발 시간을 단축하기 위하여, 공정 매개 변수에 대한 민감도 분석과, 측정할 수 없는 물리 작용에 대한 이해와 분석 소자의 구조적 형상과 물리적 현상의 시각적 파악 및 분석을 위한 반도체 공정 시뮬레이터가 필수적이다.

전술한 문제를 해결하기 위하여 많은 연구가 진행되어 현재 증착 형상을 표현하기 위하여 스트링 방법

* 正會員, 仁荷大學校 電子電氣컴퓨터工學部

(School of Electrical and Computer Engineering, Inha University)

※ 이 논문은 2000학년도 인하대학교의 지원에 의하여 연구되었음(INHA-20681)

接受日字: 2000年6月14日, 수정완료일: 2000年11月22日

(string method), 셀 방법, 레벨셋 방법(level set method)을 사용하고 있다¹⁻³⁾. 스트링 방법은 이전의 연구에서 2차원 증착에 대한 시뮬레이션으로 훌륭한 결과를 보여 주었지만 엔트로피 상태에서 루핑 문제를 해결하기가 어렵기 때문에 3차원 구조중 준 2차원으로 해석이 가능한 축 대칭형 구조와 무한 트렌치 구조에서만 적용이 가능하다. 셀 방법을 이용한 증착 시뮬레이터는 표면 형상 정보를 셀 블럭들로 표현하므로 정확한 표면 정보를 얻고 표면 형상의 변화를 모델링하기가 어렵다. 이러한 스트링 방법과 셀 방법이 가지는 형상 표현의 어려움으로 인하여 최근엔 레벨셋 방법이 증착 시뮬레이션에서 사용되고 있다.

본 논문에서는 레벨셋 방법을 적용한 3차원 증착 시뮬레이터 개발 결과를 보고하고자 한다. 효율적으로 레벨셋 방정식을 계산하기 위하여 좁은 밴드의 계산 영역을 효율적으로 관리하고 각 계산 단계에 함수를 새로 초기화 시켜 주기 위한 알고리즘과 그림자 효과에 의한 각 위치에서의 증착물의 차이를 정확하게 계산할 수 있는 가시도 계산 알고리즘을 개발하였다. 또한, 개발된 시뮬레이터를 이용하여 스퍼터 증착에서의 증착물을 계산하고 그 결과를 보고한다.

II. 레벨셋 방법

본 논문의 시뮬레이터에서 형상의 변화를 모델링하기 위하여 적용하고 있는 레벨셋 방법은 식 (1)과 같은 레벨셋 미분 방정식을 계산함으로써 함수 ϕ 의 레벨을 각 레벨의 수직방향으로 $F\Delta t$ 만큼 이동시킨다.

$$\phi_t + F \nabla \phi = 0 \tag{1}$$

이때 F 는 각 점이 속하는 레벨이 면의 수직방향으로 움직이는 속도로 높은 레벨 방향으로 이동할 때 양의 값을 가지며 낮은 레벨 방향으로 이동할 때 음의 값을 가진다. 레벨셋 미분 방정식을 계산하기 전에 레벨셋 함수의 제로 레벨이 시뮬레이션 구조의 표면에 위치하도록 그림 1과 같이 구조 내부에서는 음의 값을 가지고 외부에서는 양의 값을 가지는 거리함수를 사용하여 초기화한다.

반도체 공정 시뮬레이션을 위해 레벨셋 방법을 이용하는 경우 형상의 표면에 해당되는 제로 레벨을 제외한 다른 레벨들의 이동은 아무런 의미를 가지지 않으므로 각 타임 스텝에서 정확히 계산되어야 할 영역은

제로 레벨에서 다음 타임 단계에서 제로 레벨이 이동되는 영역까지이다. 그러므로, 본 논문에서는 제로 레벨로부터의 밴드 폭을 그리드 사이즈의 2배까지로 하여 좁은 밴드 방법(narrow band method)을 적용하였다^{4,5)}.

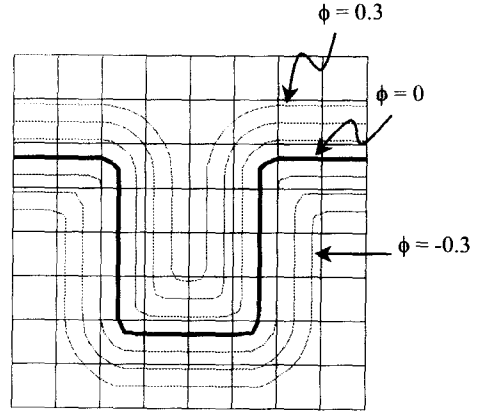


그림 1. 표면으로부터의 거리로 초기화된 레벨셋 함수. 진한 선은 표면의 위치이며 이 곳에서의 레벨셋 함수는 0값을 가진다. 각 선들은 위에서부터 $\phi=0.3, 0.2, 0.1, 0, -0.1, -0.2, -0.3$ 의 값을 가진다

Fig. 1. The level set function initialized by the signed distance function from each grid point to the initial front. Dark line is zero level set corresponding to front. Each level has a value of $\phi=0.3, 0.2, 0.1, 0, -0.1, -0.2, -0.3$ from top.

좁은 밴드 방법을 적용할 때, 제로 레벨이 계산 영역의 경계까지 이동할 경우 제로 레벨 주변의 레벨셋 함수는 다시 거리 함수로 초기화 시켜 주어야 하므로 본 시뮬레이터에서는 이를 위하여 새로운 반복법에 의한 초기화 방법을 개발하였다. 초기화된 각각의 위치에서의 레벨셋 함수, $\phi^{new}(x)$ 는 $F=1$ 일 때 각 점의 레벨셋 함수의 값이 초기화되기 전의 ϕ^{old} 에서 0으로 되는데 걸리는 시간과 같으므로 다음의 수식을 만족하는 적분구간을 계산하면 된다.

$$\phi^{old} + \int \phi^{old}_t dt = 0 \tag{2}$$

ϕ^{old} 의 값을 시간에 대한 1차식으로 근사화 하면,

$$\phi^{old} + \Delta t \phi^{old}_t = 0. \tag{3}$$

이 되므로, 식 (1)을 식 (3)에 대입하여 정리하면, ϕ^{new} 는

$$\phi^{new} \approx \Delta t = \frac{\phi^{old}}{|\nabla \phi^{old}|} \quad (4)$$

된다.

실제 반복법에 의한 계산에서 식 (4)는 진동, 발산할 수 있으므로 다음과 같이 수정된 식을 이용하여 계산하였다.

$$\phi^{n+1} = \phi^n + a \left(\frac{\phi^n}{|\nabla \phi^n|} - \phi^n \right). \quad (5)$$

식 (5)에서 ϕ^{n+1} 은 새로 업데이트된 레벨셋 함수이고, ϕ^n 은 이터레이션(iteration) 전의 레벨셋 함수이다. 그리고 a 는 $0 < a \leq 1$ 의 범위를 가지는 임의의 계수이다.

III. 증착 시뮬레이션 결과 및 분석

본 논문에서는 3차원 증착 시뮬레이션을 수행하기 위하여 그림 2와 같이 타겟에서 기판으로 입사하는 입자의 그림자 효과에 의한 직접 입사 유속과 표면 반사와 스퍼터링에 의한 간접 입사 유속을 계산한다.

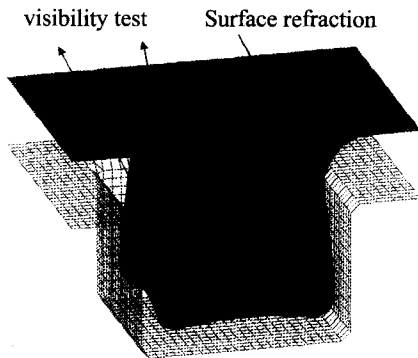


그림 2. 일반적인 증착 시뮬레이션을 위한 계산 모델.
Fig. 2. A model of general deposition process simulation.

플라즈마 소스에서 입사한 이온과 충돌하여 방출되는 타겟 입자의 분포는 코사인 분포를 가지고 타겟에서 방출되어 나온 입자들의 분포는 기판으로 입사되어 들어오는 입자들의 분포와 같다고 가정하면 표면으로 들어오는 입자의 직접 입사 유속은

$$F_{inject} = \int \int \Gamma(\theta, \phi) k \cos \theta \cos \theta' d\theta d\phi \quad (7)$$

로 계산된다. 식 (7)에서 $\Gamma(\theta, \phi)$ 는 표면에서 θ, ϕ 방향

으로 들어오는 입자에 대한 가시도 함수로 이 각도로 볼 수 있을 때 1을 볼 수 없을 때 0의 값을 가진다. 각각의 각도에 대한 가시도 검사는 그림 2와 같이 표면에서 시뮬레이션 영역 밖을 향하는 직선 상에 있는 레벨셋 함수의 부호를 검사함으로써 계산하였다. 이때, 메쉬 안에서의 레벨셋 함수는 각 노드의 값으로부터 내삽된 함수를 사용함으로써 부드러운 3차원 곡면을 가지는 구조에서의 가시도 검사를 할 수 있다. 증착 시뮬레이션에서 가시도 함수는 타겟에서 $-\theta, -\phi$ 로 방출된 입자가 표면으로 입사될 수 있는가를 결정함으로써 그림자 효과에 의한 증착률 차이를 계산하기 위한 함수이다. θ' 은 입사되어 들어오는 입자의 방향과 표면 수직 방향간의 각도로 이 각도로 들어오는 입사 입자의 직접 입사 유속을 계산하기 위해 사용된다.

반사되어 들어오는 입자들은 계산 영역의 모든 면으로부터 들어올 수 있으므로 반사되어 들어오는 이온의 유속은

$$F_{ref}(r_2) = \int \Gamma(r_1, r_2)(1 - \gamma)F_{incoming}(r_1)\cos \theta' \cos \theta'' dS \quad (8)$$

로 계산된다. 식 (8)에서 $\Gamma(r_1, r_2)$ 는 r_1 에서 반사되어 r_2 로 들어오는 이온에 대한 가시도 검사 함수이고 γ 는 흡착 계수, $F_{incoming}$ 은 이전 단계에서 계산된 들어오는 이온의 유속이다. θ' 은 r_1 에서 표면 수직 벡터와 r_1 에서 r_2 로의 직선이 이루는 각도이고 θ'' 은 r_2 에서 표면 수직 벡터와 r_2 에서 r_1 방향의 직선이 이루는 각도이다. 이때 거친 표면에서 이온들은 표면 수직 방향으로부터 코사인 분포로 반사 또는 스퍼터링된다고 가정하였다.

증착률은 소스로부터 직접 입사되어 들어온 이온의 입사 유속과 표면에서 반사되어 들어오는 이온의 입사 유속의 합에 비례한다. 총 입사 유속과 증착률간의 비례 상수는 증착 되는 물질의 종류에 따라 다르게 결정된다.

그림 2와 3은 중형비가 0.67인 사각 구조물에 대한 스퍼터 증착 시뮬레이션 결과이다. 입사되는 입자가 코사인 분포를 가질 때 기판으로 입사되는 각도가 수직에 가까울수록 입사량이 크므로 위를 향하는 면의 증착률이 옆을 향하는 면의 증착률보다 더 큰 값을 가진다. 밀면의 각 위치에서의 가시각 범위는 밀면 중앙에서 멀어질수록 수직에서 멀어지는 범위를 가지므로 밀면 중앙에서의 증착률이 밀면 모서리에서의 증착률

보다 크게 된다. 그리고, 옆면에서 횡방향으로 나타나는 증착물의 차이는 모서리 부분이 중앙보다 작은 각시각을 가지기 때문이다. 이러한 3차원 홀 구조는 무한 트렌치 근사화를 사용하여 2차원으로 시뮬레이션하는 경우 옆면의 증착물은 정확하게 계산될 수 없다.

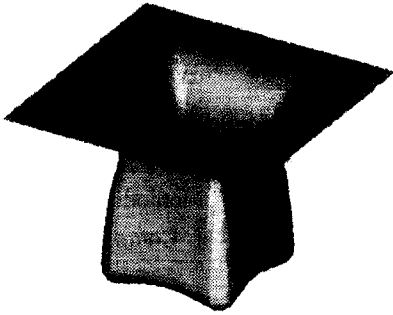


그림 3. 종횡비 0.67의 사각 홀에 대한 스퍼터 증착 시뮬레이션 결과
 Fig. 3. A result of sputter deposition process simulation. The aspect ratio of square hole is 0.67.

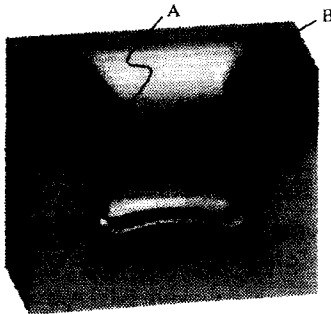


그림 4. 스퍼터 증착 시뮬레이션에서 표면에서의 반사와 리스퍼터링을 고려한 경우 (A)와 고려하지 않은 경우 (B)의 프로파일의 차이
 Fig. 4. The profile difference of sputter deposition in cases that particles can reflect or re-sputter on a surface (A) and can't (B).

그림 4는 종횡비가 0.67인 사각 구조물에 대한 스퍼터 증착 시뮬레이션 결과이다. 입사되어 들어오는 입자의 에너지가 10keV 보다 낮아서 입사 이온들이 전부 증착 하는 경우(B)의 단면도와 입사되어 들어오는 입자의 에너지가 충분히 높아 이온들이 표면에서 반사와 스퍼터링 하는 경우(A)의 단면으로 각각에 대해 흡착 계수를 1과 0.3으로 가정하였다. 이때의 스텝 커머리지는 각각 20%, 33% 이고, 측면에서 최소 증착 너비와 최대 증착 너비의 비는 0.6, 0.8로 흡착 계

수에 의한 증착 균일도의 차이를 알 수 있었다.

그림 5(a)와 그림 5(b)는 종횡비가 1인 사각 홀에 스퍼터 증착한 3차원 시뮬레이션 결과와 이에 대한 2차원 단면도이다. 그림 5(c)와 그림 5(d)는 종횡비가 2인 사각 홀에 스퍼터 증착한 3차원 시뮬레이션 결과와 이에 대한 2차원 단면도이다. 종횡비가 커짐에 따라 밑면에서 소스를 볼 수 있는 각도 범위의 위치에 따른 차이가 작아지므로 홀의 종횡비가 2인 경우엔 종횡비가 1인 경우에 비해 밑면의 위치에 따른 증착물의 차이가 작음을 발견할 수 있다.

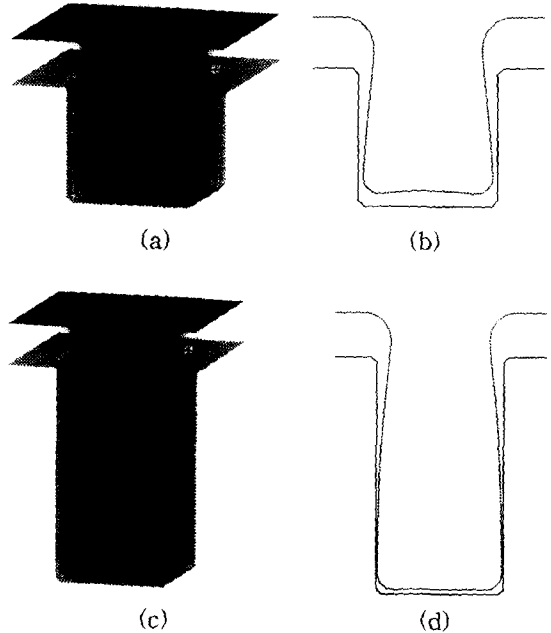


그림 5. 스퍼터 증착 시뮬레이션 결과 (a) 종횡비 1인 사각홀의 증착 후 사시도 및 (b) 단면도, (c) 종횡비 2인 사각홀의 증착 후 사시도 및 (b) 단면도
 Fig. 5. Results of sputter deposition simulation. (a) Feature surface and (b) profile of square hole of which aspect ratio is 1. (c) Feature surface and (d) profile of square hole of which aspect ratio is 2.

IV. 결 론

본 논문에서는 증착 공정에서의 3차원 형상 변화를 레벨셋 방법을 이용하여 모델링하였다. 정확한 증착 형상을 계산하기 위하여 3차원 가시도 검사 알고리즘과 표면 반사 알고리즘을 적용하였다. 3차원 증착에서

보여지는 증착 형상의 특징들을 시뮬레이션 결과를 이용하여 설명하였으며, 입사 입자의 표면 흡착률에 따른 증착 프로파일의 변화와 콘택홀의 증횡비에 따른 증착 프로파일의 변화를 시뮬레이션 결과를 이용하여 설명하였다.

참 고 문 헌

[1] D. S. Bang, J. P. McVittie, and K. C. Saraswat, "Three Dimensional PVD Virtual Reactor for VLSI Metalization," IEEE IEDM, 1995.

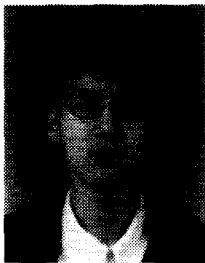
[2] D. Adalsteinsson and J. A. Sethian, "A Level Set Approach to a Unified Model for Etching, Deposition, and Lithography," Jour. of Comp. Phys., 138, pp. 193-223, 1997.

[3] W. Pyka, P. Fleischmann, B. Hain, and S. Selberherr, "Linking Three-Dimensional Topography Simulation with High Pressure CVD Reaction Kinetics," Conf. on Simulation of Semiconductor Processes and Devices, pp. 199-202, 1999.

[4] D.L. Chop, "Computing Minimal Surfaces via Level Set Curvature Flow," Jour. of Comp. Phys., 106, pp. 77-91, 1993.

[5] D. Adalsteinsson and J. A. Sethian, "A Fast Level Set Method for Propagating Interface," Jour. of Comp. Phys., 118, pp. 269-277, 1995.

저 자 소개



鄭賢洙(學生會員)

1976년 5월 7일생. 1995년 인하대학교 전자재료공학과(공학사). 1999년~현재 인하대학교 전자재료공학과 석사과정. 주관심분야는 반도체 소자 및 공정 시뮬레이션 등임

元太映(正會員) 第35卷 D編 第5號 參照

1959년 2월 21일생. 1981년 서울대학교 전자공학과(공학사). 1983년 한국과학기술원 전기 및 전자공학과(공학석사). 1989년 미국 University of Illinois at Urbana-Champaign 전자공학과(공학박사). 1989년~1990년 미국 State University of New York 조교수. 1990~1991년 삼성전자(주) 수석 연구원. 1991년~2000년 인하대학교 공과대학 전자전기컴퓨터공학부 부교수. 2000년~현재 인하대학교 공과대학 전자전기컴퓨터공학부 교수. 주관심 분야는 반도체 소자 및 공정 등임