

## 사용자 친숙형 반도체 공정 시뮬레이터의 구성에 관한 연구

이준하\* · 이흥주

### A Study of Semiconductor Process Simulator with User Friendly Framework

Jun-Ha Lee\* and Hoong-Joo Lee

**요 약** 본 논문에서는 반도체 공정 시뮬레이션을 위해 산화, 확산 및 이온 주입 공정을 모델링하고, 효율적인 실행과 상호 연관된 연속 공정의 시뮬레이션이 가능하도록 통합화된 환경을 구축하였다. 점성적 스트레스 모델을 이용한 산화 공정은 유속-압력 알고리즘과 경계요소법을 이용하여 안정된 해를 얻었으며, 선확산과 산화증배 현상이 포함된 확산 공정은 전진해법과 유한요소법을 이용하였다. 또한 이온 주입 공정은 TRIM을 기본으로 다양한 공정 조건에 대한 모델이 추가된 몬테카를로 방법을 사용하였다. 편리한 사용자 입력 인터페이스와 그래픽적 출력을 제공하고, 윈도우의 API함수를 이용하여 PC상에서 적은 메모리라도 빠른 결과를 얻을 수 있도록 하였으며, 객체 지향적인 모듈화로 타 시뮬레이터와의 호환성이 가능하도록 구성하였다.

**Abstract** In this paper, we modeling the oxidation, diffusion, and ion-implantation for semiconductor process simulation, and construct the integrated framework for efficient execution and continuous process simulation. For oxidation process, to predict the accurate LOCOS shape and stress distributions, stress-dependent viscous model was performed using SVP algorithm. For diffusion process, predeposition and OED simulation was performed using point defect theory. For ion implantation, Monte-Carlo method based on TRIM simulation was performed with various process conditions. For input to each unit process, we used the dialog boxes which are windows application's standards. This dialog box allows us to verify and minimize input error at input steps. Using the combination of compiler's function and windows's API function, simulation was done with small memory size.

**Key Words** : Process simulator, Oxidation, Diffusion, Ion-implantation, Framework

### 1. 서 론

ULSI 및 GSI 기술 시대의 서브마이크론 트랜지스터의 특성은 다차원적인 소자 구조에 의해 큰 영향을 받고 있으며, 소자 특성에 영향을 주는 소자 격리 영역, 불순물 확산과 이온 주입 등에 의한 불순물 농도의 감소 추세, 측면 확산 및 비정상 현상 등을 다차원적으로 예측하는 것은 필수적이다[1]. 이러한 소자의 공정상에서의 특성 파악과 이를 통한 공정상의 기술 및 소자의 특성 예측은 무수한 실험적인 결과를 이용하고 있지만, 차세대 초 고집적회로 시대에서의 실험을 통한 공정상의 기술 향상은 막대한 투자 규모와 실험에 소요되는

긴 시간 등을 고려할 때 많은 제약을 받고 있다. 이의 해결 방법으로 제시되고 있는 반도체 공정 및 소자 현상을 모델화하여 해석하는 접근법은 안정된 모델과 급격히 발전하는 컴퓨터의 계산 속도 및 데이터 처리 능력에 힘입어 새로운 기술 개발 도구로서 인식되고 있다. 공정물리와 소자 기능의 이해, 투자 비용 및 개발 소요 기간의 단축 등의 목적을 이룩하기 위하여 공정, 소자 및 회로 등에 대한 컴퓨터 시뮬레이션을 통한 접근법이 실험에 의한 접근법의 대안으로 기여하여 왔으며, 기술 발전의 속도는 경험적인 연구와 과학적인 모델링의 결합으로 급격하게 증가될 수 있을 것이다. 본 논문은 이론적인 현상이 실험적인 데이터로부터 추론되고, 현상 또는 시스템 모델이 이러한 이론으로부터 개발되어, 관찰된 현상의 이해를 제공할 뿐 아니라 아직 실험적으로 시도되지 않은 상태하의 현상을 예측할 수 있도록 반도체 산화 공정, 확산 공정 및 이온 주입 공정 시뮬레이터

\* 상명대학교, 컴퓨터시스템공학전공  
Tel : 041-550-5362  
E-mail : junha@smu.ac.kr

를 개발하였으며, 통합화하여 연속적인 공정의 시뮬레이션이 가능하도록 구축하고, 객체 지향적인 형태로 구성하여 타 시뮬레이터와의 호환성을 이루었다. 특히 시뮬레이션의 전문가가 아닌 일반 개발자도 손쉽게 오류 없이 시뮬레이션이 가능하도록 입, 출력부분을 사용자 입장에서 그래픽적으로 처리하였고, 운영시스템 또한 워크스테이션과 개인용컴퓨터 모두에서 가능하도록 하였다.

## 2. 본 론

### 2.1 산화 공정 모델

다차원 비평탄 실리콘 구조에서 비균일 산화층은 트랜치 또는 LOCOS 등의 소자 격리용 구조에서 매우 중요한 역할을 한다. 열산화 공정의 개략적인 메커니즘은 가스 형태의 산화족이 윈도우를 통하여 기존의 산화층으로 투입, 확산되어 들어가 실리콘/산화층 계면에 도달하게 되는데 이러한 산화족 확산과정으로 인한 산화층 농도는 확산방정식의 다차원적인 풀이로서 구할 수 있다[2]. 이와 더불어 계면에 도달한 산화족과 반응하여 생성된 산화물의 표면을 향한 이동은 산화물의 이동을 지배하는 방정식의 설정과 이의 풀이로서 이루어지게 되며, 내비어-스토크 방정식을 기초로 점성적 모델에 산화막 성장시 발생하는 스트레스 영향을 고려한 모델을 사용하였다. 산화족 확산은 산화막 표면을 통해 유입된 산화족이 초기 산화층을 확산하는 중의 과정을 지배하는 확산 메커니즘이 정상상태라는 조건에서 유도한 라플라스 방정식 형태로 수식화하여, 주어진 공정 구조에 대해 적합한 경계조건으로 실리콘 표면에서의 산화속 농도를 계산한다.

### 2.2 확산 공정 모델

확산 공정의 물리적 이론은 2차 편미분 방정식인 픽의 확산 방정식을 이용하는 연속체 이론과 결공형, 틈새형과 같은 점결함(point defects)과 불순물 원자간의 상호 작용을 포함하는 원자이론이다. 확산의 연속체 이론은 물질 전달과 열 전달 사이에 유사성에 기초를 두고 적절한 경계조건과 불순물의 확산계수를 이용하여 픽의 확산 방정식의 해를 구함으로써 확산 현상을 설명하는 것인데 불순물 확산 계수는 표면 농도, 접합깊이, 농도 분포 등의 실험 자료로부터 결정된다. 실리콘에서 불순물 농도가 낮을 때 측정된 불순물 분포는 일정한 확산계수로 풀어낸 픽의 확산 방정식의 해와 잘 일치하나, 농도가 높을 때는 단순한 확산 이론으로는 충분히 설명할 수 없으며 여러 가지 다른 요소들(농도의존성 확산 효과, 점결함과 불순물의 상호작용에 의한 확산

효과) 및 기타 비정상적인 확산 효과 등이 고려되어야 한다[3]. 저농도 및 고농도 불순물 확산 방정식의 수치 해석 방법으로는 유한 요소법중의 하나인 Galerkin 방법을 사용하였으며[4], 경계조건은 마스크와 실리콘이 접하고 있는 부분과 실리콘의 옆면은 Neumann 조건으로, 산화시 산화족들과 실리콘 원자들간의 재반응에 의해 실리콘 경계면의 이동이 발생하는 불순물 확산 해석 시 이동경계조건을 고려하였다[5]. 또한, 반복법을 적용하여 해가 주어진 에러 범위( $\epsilon = 0.05$ ) 내에 수렴하도록 하였다. 확산 방정식내의 시간에 대한 적분에는 후방차분법을 이용하여 시간 이산화를 수행하였고 행렬해법으로 전진해법을 사용하였다.

### 2.3 이온주입 공정 모델

이온 주입시 이온은 이온 주입기에 의해 가속되어 운동에너지를 갖게 되며, 고체 물질 속에서 가속된 운동 에너지에 의해 이온은 이온-원자 충돌 및 이온-전자와의 충돌로 인해 점차 에너지를 잃으면서 비행하게 되고 에너지를 전부 잃게 되면 고체 내의 다차원 공간 상에 정지하게 된다. 이온-원자간의 핵 충돌에 의한 산란 과정에 의해서만 진행 방향이 바뀌며 이온-전자간의 충돌 산란 과정에 의해서는 에너지 손실만이 발생하는 독립적인 두 산란 메커니즘으로 해석한다. 이온-원자간의 핵 충돌은 탄성 충돌에 의한 에너지 손실로, 이온-전자간은 비탄성 충돌에 의한 에너지 손실로 가정하며, 충돌간의 진행은 직선으로 가정한다. 그러므로 이온-원자간의 핵 충돌에 의한 이온의 핵 에너지 손실이 발생하는 핵 저지력과 이온-전자간 충돌로 인한 에너지 손실이 발생하는 전자 저지력의 합으로 에너지 손실을 계산한다[6]. 실리콘의 결정 구조에서 산란간의 비행 거리 및 산란각 계산을 위한 충돌 변수는 난수가 아닌 계산 값을 사용하였고 도즈량에 따른 격자 손상 효과를 고려한 모델을 새로이 적용하였다. 전자 저지력 계산을 위해 ABS 모델을 사용하였다[7]. 그리하여 이온 주입 공정 조건상에서 발생하는 에너지 의존성, 기판 틸트와 로테이션 의존성, 도즈량 의존성, 실리콘의 결정 구조 의존성, 산화층 의존성, 열적 격자 진동 의존성, 이온 빔 퍼짐 의존성, 마스크 구조 및 크기 의존성 등을 모두 고려한 몬테카를로 이온 주입 공정 시뮬레이션을 통하여 그 결과를 분석하였다[8].

### 2.4 통합화된 시뮬레이션 환경

통합형 시뮬레이터에 필수적인 요소 중의 하나인 용이한 사용자 인터페이스의 구축을 위해 통합 시뮬레이터의 기본 조건을 설정하였다. 첫째로, 입력과 진행 상황, 출력을 그래픽 처리함으로써 사용자가 보다 쉽게

이해할 수 있도록 하였다. 이를 위해 통합 시뮬레이터가 구동하는 환경을 윈도우 호환으로 하여 PC에서뿐만 아니라 워크스테이션에서도 동일한 사용자 인터페이스를 제공하도록 하며 다양한 그래픽 자원을 사용하였다. 둘째로, 대화 상자식의 입력 인터페이스를 제공하였다. 이는 사용자가 새로운 포스트 스크립트 언어를 연구하지 않아도 될 뿐 아니라 입력시의 오류를 최소화하여 올바른 결과를 얻을 수 있는 장점이 있다. 셋째로, 시뮬레이션 진행 상황을 각 공정 특성에 맞게 조절하여 사용자로 하여금 현재의 진행 정도를 쉽게 인지하도록 하여 반복되는 시뮬레이션시에 최적의 배위 및 공정 조건을 설정하는데 도움이 되도록 하였다. 산화 공정의 경우에는 시간으로 확산 공정은 계산 단계별로 구성하였으며, 이온 주입의 경우에는 도즈량에 따른 진행상태를 그래픽으로 나타낸다. 네 번째로, 결과의 출력은 모니터, 프린터, 파일등으로 하여, 사용자가 다차원적인 현상을 그래픽으로 판단할 수 있도록 하며, 파일로 저장과 함께 데이터 베이스 구축이 되도록 구성하였다. 다섯 번째로, 각각의 프로그램을 모듈화하여 현재 개발된 통합 시뮬레이터에 등록된 모델들 외에 새로운 모델을 추가할 경우 기존의 모델들과의 수행시의 충돌을 없도록 하

며, 시간과 정확도라는 조화에 맞는 최적의 통합 시뮬레이터가 되도록 하였다. 객체 지향적인 C++컴파일러 언어를 사용하여 객체지향 개념을 도입하여 최적의 모듈화를 구성하였고, 각 공정 별로 동적으로 링크되는 라이브러리를 생성하여 프로그램 코드를 분산처리가 용이하도록 하였다. 사용된 윈도우즈 API함수들은 GlobalAlloc( ), GlobalLock( ), GlobalUnlock( ), GlobalFree( )이며, 이 함수들은 이론적으로 시스템의 주 메모리뿐만 아니라 윈도우즈가 사용하고 있는 가상 메모리 모두를 사용할 수 있다. 이를 위해 첫째 단계로서 이차원 배열을 일차원 배열 포인터로 설정한다. 두 번째 단계에서는 공용체를 사용하여 일차원 배열 포인터와 같은 번지를 가지는 1byte크기의 포인터 변수를 설정한다. 마지막으로 필요한 이차원 배열의 크기만큼 4byte크기의 포인트 변수에 메모리 블록으로 할당한다. 공용체는 동일한 기억 장소를 서로 다른 데이터 형이 공동으로 사용할 수 있도록 하는 유도형 데이터이다. 즉 하나의 기억 장소를 int형 변수, float형 변수, char형 배열, 구조체 변수 등등 원하는 데이터들이 서로 공동으로 사용할 수 있도록 해준다. 통합 시뮬레이터 구성을 위한 전체적인 모듈 구성은 그림 1과 같다.

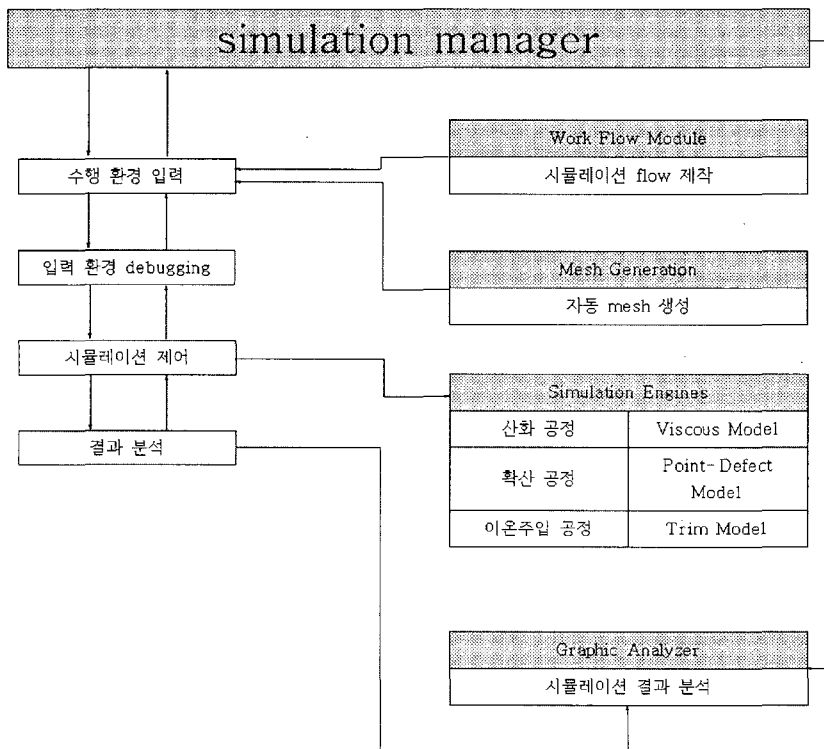


그림 1. 시뮬레이터의 모듈 구성 및 데이터 흐름도

### 2.5 시뮬레이션 결과

#### 2.5.1 입력 모듈

사용자가 작성한 입력 파일이 타당한가에 대한 검증은 기존의 시뮬레이터의 경우 포스트 스크립트 언어를 해석해 가며 실행 중에 점검하였다. 이는 실행이 시작되어야 그 오류를 발견할 수 있어 많은 시간적인 손실을 가져올 수 있다. 본 시뮬레이터는 입력이 완료됨과 동시에 검증을 함으로써 보다 사용자에게 편의를 도모하였으며, 산화, 확산 및 이온 주입에 대한 입력 환경 인터페이스는 그림 2에 나타내었다.

#### 2.5.2 출력 모듈

그림 3의 (a)는 스트레스-의존적 점성 모델을 이용한 산화 공정 시뮬레이션의 진행 과정으로, 공정 조건은 온도 1000°C, 시간 30분, 산화막 두께 0.03  $\mu\text{m}$ , 마스크 두께 0.15  $\mu\text{m}$ 이다. 그림 3의 (b)는 점결함 모델을 이용한 선확산 공정 시뮬레이션의 수행 과정을 보인 것이다. 실리콘 기판이  $1.0 \times 10^{14}/\text{cm}^2$  도핑된 상태에서 온도 1000°C, 시간 10분, 윈도우 크기 0.4  $\mu\text{m}$ , 경계 농도  $1.0 \times 10^{20}/\text{cm}^2$ 의 공정 조건으로 실행한 경우이다. 그림 3의 (c)는 몬테-카를로 모델을 이용한 3차원적인 이온 주입 시뮬레이션의 결과로서, <100>방향의 실리콘 정결에 붕소 이온을 5KeV의 입사 에너지로 윈도우 크기 0.02  $\mu\text{m}$ 에 이온 주입한 결과를 나타내고 있다.

### 3. 결 론

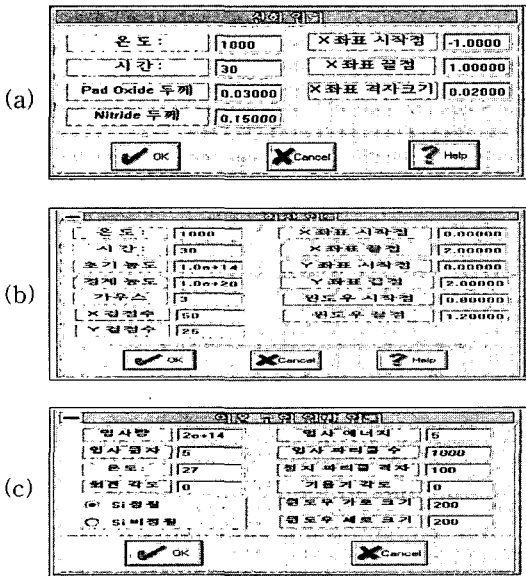


그림 2. 시뮬레이터의 모듈 구성 및 데이터 흐름도.  
(a)산화공정입력 (b)확산공정입력 (c)이온주입공정입력

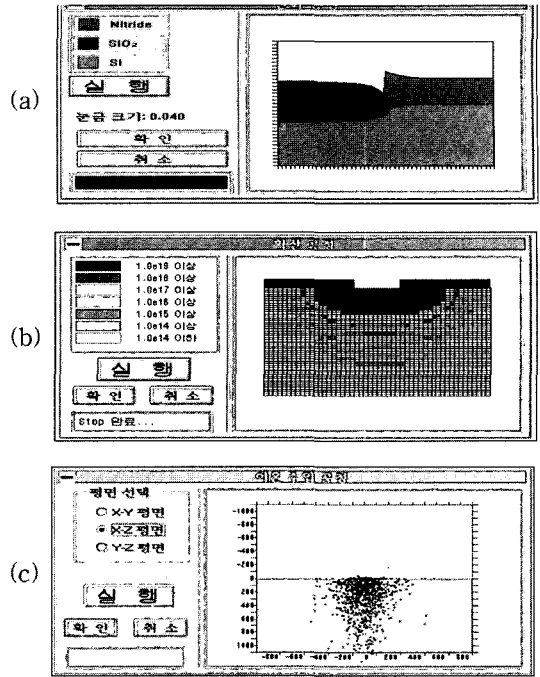


그림 3. 시뮬레이터의 모듈 구성 및 데이터 흐름도  
(a) 산화공정결과 (b) 확산공정결과 (c) 이온주입공정결과

본 논문에서는 사용자가 손쉽고 정확하게 시뮬레이터를 사용하도록 프레임워크 및 입,출력 부분을 구성하였다. 또한 반도체 공정을 위한 통합 시뮬레이터 개발에 대한 전반적인 고찰과 각 단위 공정별로의 모델링에 대해서 논의하였다. 메모리 사용의 제한으로 워크스테이션 급에서만 제작되었던 시뮬레이터를 개발 언어의 공용체 개념과 윈도우의 API함수들을 조합하고 최적의 모듈화를 꾀함으로써 해결하였다. 이로써 윈도우 및 리눅스기반의 어떤 환경에서도 사용될 수가 있게 되었다. 또한 사용자의 입력 초기에 오류 검증을 함으로써 수행시의 시행착오를 줄일 수 있었다.

### 참고문헌

- [1] R. W. Dutton and Z. Yu, "Technology CAD-Computer simulation of IC processes and devices", Kluwer Academic Publisher, Massachusetts, 1993.
- [2] W. Fichtner, D. J. Rose and R. Bank, "Semiconductor Device Simulator", IEEE Trans. Electron.Device, ED-29 pp. 218-231, 1981.
- [3] D. J. Chin, Two "Dimensional Oxidation Modeling and Applications", Stanford University, June, 1983.
- [4] D. Hegen, "Element-Free Galerkin Methods in Com-

- bination with Finite Element Approaches”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 135, No. 1-2, pp. 143-166, 1996.
- [5] W. Vandervorst, T. Clarysse, N. Duhayon, P. Eyben, T. Hantschel, M.Xu, T. Janssens, H. De Witte, T. Conard, J. Deleu, and G. Badenes, “Ultra shallow junction profiling,” in *IEDM Tech. Dig.*, pp. 429-432, Dec., 2000.
- [6] C. C. Lee, A. L. Palisoc and J. M. W. Baynham “Thermal Analysis of Solid-State Devices Using the Boundary Element Method”, *IEEE Trans. Electron Dev.*, Vol.35, No.7, July 1988.
- [7] W. Bohmayr, A. Burenkov, J. Lorenz, H. Ryssel, and S. Selberherr, “Trajectory split method for Monte Carlo Simulation of Ion Implantation”, *IEEE Trans. Semiconductor Manufacturing*, Vol. 8, No. 4, pp. 402-407, 1995.
- [8] Vassil Palankovski, et. al., “A Methodology for Deep Sub-0.25 m CMOS Technology Prediction”, *IEEE Trans. on Electron Devices*, Vol. 48, No. 10, Oct., 2001.