

열산화 공정 시뮬레이션을 위한 3차원 적응
메쉬 생성기 제작에 관한 연구
(Three Dimensional Adaptive Mesh Generator
for Thermal Oxidation Simulation)

윤상호*, 이제희*, 윤광섭**, 원태영*

* : 인하대학교 전자재료공학과, ** : 인하대학교 전자공학과
인천시 남구 용현동 253

Sangho Yoon*, Jaehee Lee, Gwangsub Yoon, Taeyoung Won
Dept. Electronic materials and devices eng., Inha University
253 Yonghyun-Dong, Nam-Gu, Incheon, Korea, 402-751
Tel) 032-860-7436 FAX) 032-862-1350 E-mail) ysh@hselemde.inha.ac.kr

Abstract

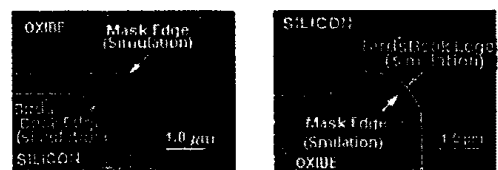
We have developed the three dimensional mesh generator for three dimensional process simulation using the FEM(Finite Element Method). Tetrahedron element construct the presented three dimensional mesh, which is suitable for the simulation of three dimensional behavior of the LOCOS. The simulation of thermal oxidation is one of the problem in scale downed semiconductor processes. As three dimensional simulators use the huge size of the memory, we use the efficient method that generates the new nodes inside the growing oxide and removes the nodes nearby the SiO₂/Si interface in silicon. The presented three dimensional mesh generator was designed to be used in various process simulations, for instance thermal oxidation, silicidation, nitridation, ion implantation, diffusion, and so on.

I. 서론

256MB이상의 고밀도 DRAM 셀을 제조하기 위하여 소자의 집적도가 높아지고 미세화가 진행 되면, 소자간의 절연을 위한 LOCOS 형상이 3차원적인 거동을 보이게 된다. 즉, 최근 질화막 마스크의 코너에 있어서 Bird's Beak 길이가 질화막 마스크 구조에 따라 변화한다는 것이 알려져

있다^[1].

제 1 도는 1200Å의 질화막을 500Å 두께의 산화막 위에 부분적으로 덮고 있는 Hole 구조와 Island 구조에 대해서 1000°C 170분간 습식 산화하여 LOCOS를 형성한 후 질화막 및 지하 산화막을 식각하여 찍은 SEM 사진이다. 제 1 도에 도시한 바와 같이 질화막 마스크 주위에 LOCOS가 형성될 경우(제 1(a) 도의 Hole 구조) 질화막 마스크의 코너에서의 Bird's Beak의 길이가 변에서의 길이보다 길어지는 것으로 관찰된다. 한편, 제 1(b) 도와 같이 LOCOS 주위에 질화막 마스크가 존재하는 경우에는 마스크의 중심부에서의 Bird's Beak의 3차원적인 거동은 다음 두 가지 이유에서 기인하는 것으로 알려져 있다. 즉, Hole 구조의 경우 질화막 마스크의 코너 부근에는 주위의 마스크의 변에 비해 산화제의 농도가 높고, 질화막에 의한 스트레스가 마스크 코너 부근이 작기 때문인 것이다. 이상의 설명에서 알 수 있듯이, 미세 반도체 공정에서 LOCOS의 형태를 정확히 예측하기 위하여서는 산화제의 산화막 내에서의



(a) Hole 구조

(b) Island 구조

제 1 도 마스크 모서리 부분에서의 산화막 형태^[1]

확산과 산화막 유동을 3차원적으로 모델링하여 풀어야 한다. 따라서, 본 논문에서는 차세대 반도체 제조에 있어 핵심 단위 공정인 열산화 공정을 모의 실험하기 위한 3차원 산화 시뮬레이터에 관하여 논하고자 한다.

II. 기본 방정식

열산화의 기본 모델 방정식은 정상 상태에서의 산화제의 확산 방정식과 비압축 산화막의 유동 방정식이다[2]. 즉, 산화제의 산화막 내에서의 농도를 $C(x, y, z)$, 산화제의 스트레스 의존 확산 계수를 D_{eff} 라하면 산화제의 확산은 다음 식으로 표현된다.

$$\nabla \cdot (D_{eff} \nabla C) = 0 \quad (1)$$

또한, 산화막의 스트레스 의존 점성도를 μ , 산화막 요소의 유동 벡터를 \vec{v} , 정압력(Hydrostatic Pressure)를 P 라 할 경우, 비압축성 유체인 산화막은 다음 방정식을 만족한다.

$$\mu \nabla^2 \vec{v} = \nabla P \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (3)$$

상기의 방정식은 아래의 각 경계면에서 경계 조건과 함께 유한요소법(Finite Element Method)로 풀게 된다.

$$v = -(1-\alpha) \frac{k_s C}{N} n ; \text{실리콘/산화막 경계} \quad (4)$$

$$P = P_a - \frac{\gamma}{R} + 2\mu \frac{\partial v_n}{\partial n} ; \text{노출 산화막} \quad (5)$$

$$P = P_f - \frac{\gamma}{R} + 2\mu \frac{\partial v_n}{\partial n} ; \text{질화막/산화막 경계} \quad (6)$$

여기서 α 는 성장된 산화막과 소모된 실리콘 사이의 용적비, k_s 는 스트레스 영향을 고려한 표면 반응 계수, N 은 단위 산화막 체적 내에 존재하는 산화제의 분자수, n 은 경계면에서의 법선 방향의 단위 벡터, P_a 는 챔버 주위 압력, P_f 는 질화막의 스트레스, γ 는 표면 장력, R 은 곡부 곡률, v_n 은 유체 속도의 법선 성분이다. E_{nit} 를 질화막의 Young 계수, I 는 질화막 관성질량, $T(x, y, t)$ 는 표면위치, D_{nit} 는 질화막의 두께, ν 를 포아송 계수라 하면 산화막 위의 질화막의 스트레스는 다음과 같이 표현된다.

$$P_f = E_{nit} I \left(\frac{\partial^4 T}{\partial x^4} + 2 \frac{\partial^4 T}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4 T}{\partial y^4} \right) \quad (7)$$

$$I = \frac{D_{nit}^3}{12(1-\nu^2)} \quad (8)$$

비평면 형태, 즉 곡면 형태의 3차원 LOCOS 형태의 경우에, 산화막의 성장 속도는 각 곡부 지점에서의 스트레스의 크기에 의해 의존하게 되는데, 표면 반응 계수 및 확산 계수, 점성도 등을 다음과 같이 모델링한다.

$$k_s = k_o \exp\left(\frac{\sigma_{nn} V_k}{k_B T}\right) \quad (9)$$

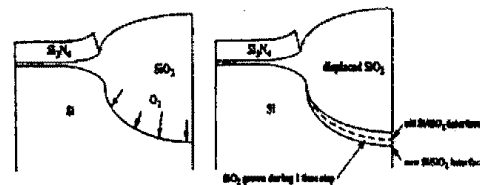
$$D_{eff} = D_o \exp\left(-\frac{P V_D}{k_B T}\right) \quad (10)$$

$$\mu = \mu_o \exp(\beta P), \quad P < 0 \quad (11)$$

여기서 σ_{nn} 은 실리콘과 산화막 계면에서 법선 방향의 스트레스이고, V_k 는 산화막에 대한 유효 실리콘 체적, V_D 는 활성 확산 체적, β 는 실험 파라미터이다.

III. 3차원 메쉬 생성기

반도체 공정을 모의 실험하기 위한 시뮬레이터를 제작하는데 있어서, 이온 주입 또는 확산과 같은 단위 공정은 고정된 구조물 내에서 불순물의 거동을 해석하게 되지만, 산화 또는 실리사이드이션의 경우에는 이물질 사이의 경계면이 이동을 하게 되므로, 편미분 방정식에 부여되는 경계 조건이 움직이는 경계면을 따라 만족되어야 한다. 실제로, 3차원 산화 공정 시뮬레이터를 제작하기 위해서는 실리콘/산화막 경계면이 이동함에 따라 그 계면에서 노드의 생성 및 소멸을 효과적으로 관리하는 알고리즘이 필요하게 된다. 즉, 제 2도에 도시한 바와 같이 산화 공정이 진행된다면 초기의 산화막은 위로 상승하게 되고 또한 실리콘/산화막 경계면은 아래로 하강하게 된다. 만일 이동된 산화막의 메쉬 모양이 둔각 형태의 찌그러진 삼각형의 모양이 아니라면 제 2(b)도에 도시한 바와 같은 좁은 두께의 밴드 모양이 될 것이다. 따라서, 산화 공정이 진행되어 감에 따라 각 계산 시간 단계마다 새로 생성되는 산화막 밴드를 재차 메쉬하는 작업이 필요하게 된다.

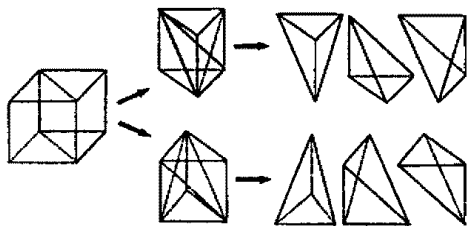


제 2 도 산화의 진행에 따라서 메쉬 구조의 변화가 필요한 영역.

본 연구에서 제작한 메쉬 생성기에서 3 차원 메쉬를 형성하기 위하여 사용하는 구성 요소들로

는 점(Point), 노드(Node), 변(Side), 삼각형(Triangle), 사면체(Tetra-hedron)과 각 물질들의 영역을 구분하기 위한 영역(Region)과 모서리 삼각형(Edge Triangle)이 있다. 점(Point)는 물리적인 위치를 의미하고, 좌표와 속도에 대한 정보를 가지며, 노드(Node)는 점에서 물질과 각종 불순물의 농도에 대한 정보를 가지는데, 이는 서로 다른 물질들의 경계 부분의 점에서 각 물질의 영역에 해당하는 노드들을 다르게 정의함으로써, 이 노드들로 이루어지게 될 사면체들이 모두 같은 물질의 노드를 가지게 되고, 유한요소법을 이용한 해를 구하기가 쉬워진다. 이렇게 정의된 노드를 이용하여 변(Side)를 형성하고, 변으로 삼각형 면을 구성한 후, 삼각형의 면들로 이루어지는 사면체를 구성하게 된다.

이렇게 정의되는 3 차원 메쉬의 기본 구조는 제 3 도에서 도시한 바와 같은 사면체들로 형성하고, 경계의 이동에 따른 노드의 제거와 생성이 용이하게 이루어지게 하기 위하여 본 연구에서 제작한 메쉬 생성기의 내부적인 데이터 구조는 다음과 같이 구성되었다.



제 3 도 육면체가 6 개의 사면체로 나누어지는 형태

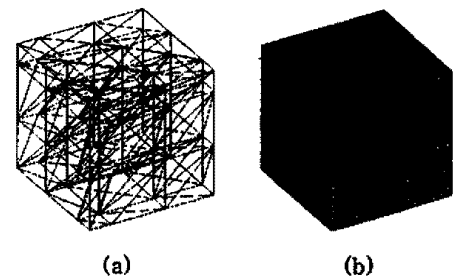
```
struct tagPoint
{
    int    nIndex;           // index of the point
    double dAxis[DIM];      // coordinates
    double dCVel[DIM];     // current velocity
    double dLVel[DIM];     // the last velocity
    short  nNumNode;       // the number of
node
    int    nNode[MAXMAT];  // indices of node
    short  state;         // // 1 or 0
};
```

이것은 점(Point)를 위한 구조체(Structure)로서 점의 번호와 좌표, 현재의 속도와 하나의 시간 단계 후에 변화될 점의 속도에 대한 데이터를 가지고 있다. 그리고 경계의 점에 대하여는 한 개의 점에 대하여 여러 개의 노드가 존재하므로, 점에서 노드의 개수와 메모리에 할당된 노드를 가리

키는 포인터(Pointer)들을 나타낸다. 또한, 후에 발생할 경계의 이동에 따른 노드의 제거와 생성 시에 메모리에 할당되었던 메모리를 삭제하고, 노드의 생성 시에 다시 메모리를 할당해야 하는 비효율성이 발생하므로, 시뮬레이션 진행의 시간을 줄이기 위하여 제거된 메쉬의 요소들은 State라는 변수에 0의 값을 지정하여 메모리에서 없애지 않고, 새로운 메쉬의 생성 시에 다시 사용하게 된다.

다음에 나타낸 것은 노드의 형성을 위한 구조체로서 내부의 변수들이 의미하는 것은 노드의 번호, 물질, 불순물의 농도이고, 구조체로 선언된 다음의 4 개의 변수들은 각각 노드와 연결된 노드와 변, 삼각형, 사면체들의 리스트(List)를 나타낸다. 그리고 노드가 영역의 내부, 경계 또는 노출된 표면에 있는 지를 나타내는 값과 이 노드가 위치하는 점을 나타내는 값, 노드의 존재 여부를 나타내는 값을 가지고 있다. 여기서 노드와 연결된 변의 개수는 최대 14개, 삼각형의 개수는 36개, 사면체의 개수는 24개로 각각 제한하는 데, 이것은 제 4 도에 도시한 바와 같이, 제 3 도에서 나타낸 기본적인 사면체의 구조를 이용하여 생성하는 초기 메쉬의 구조에서 경계의 이동과 함께 발생하게 되는 메쉬 구조의 많은 변형을 막기 위함이다.

```
struct tagNode
(
    int    nIndex;           // index
    short  nMaterial;       // material
    double pdImpurity[MAXIMP]; //impurity conc.
    struct taglist node;    // connectivity=14
    struct taglist side;    // connectivity=14
    struct taglist tri;     // connectivity=36
    struct taglist tet;     // connectivity=24
    short  nFlag;
    int    *pnPoint;        // point
    short  state;           // // 1 ro 0
);
```



제 4 도 초기 메쉬의 구조. (a) 3차원 메쉬의 내부 (b) 생성된 메쉬의 표면 구조

산화이 진행되면 산화막이 성장하면서 초기 산화막의 노출된 표면은 상승하고, 실리콘/산화막의 계면은 하강하게 된다. 이러한 산화막 경계의 이동에 따라서 3 차원 메쉬 구조에 발생하게 되는 문제점은 다음의 세 가지가 있다. 첫 번째는, 초기 산화막의 내부에 형성된 메쉬 구조가 산화막의 성장에 따라서 그리드의 간격이 점점 멀어지게 되어, 유한요소법을 이용한 산화막 내부의 계산에 대한 정밀도가 낮아지게 되므로 새로운 노드의 생성이 필요하게 된다. 두 번째의 문제점은 실리콘/산화막 계면의 노드가 하강함에 따라서 실리콘 내부의 노드와 충돌하게 되는 경우가 발생한다. 세 번째는 이동하는 경계의 노드가 실리콘 내부의 노드와 만나지 않고 노드들의 사이를 지나가는 방향으로 이동이 일어날 경우에 사면체의 형태가 역사면체로 바뀌게 되는 문제가 발생한다.

이러한 문제들의 해결 방안으로는 실리콘 내부의 노드를 이동시키거나 제거하는 두 가지의 방법이 있는데, 본 연구에서는 3차원 메쉬의 계산에 방대한 메모리의 양이 요구되므로 노드의 수가 많이 증가하는 것을 막기 위하여 성장하는 산화막 내부에서는 새로운 노드를 생성하고, 위의 두 번째와 세 번째의 경우에는 노드를 제거하는 방법을 채택하였다.

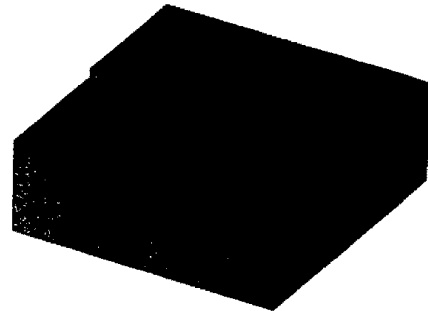
본 연구에서 제작한 3차원 메쉬 생성기를 사용하여 형성한 메쉬의 구조를 제 5 도와 제 6 도에 도시하였다. 제 5 도에서는 Island 구조의 산화막 성장을 위한 구조에 대하여 메쉬를 생성한 결과를 보여주고 있는데, 정확한 계산이 필요한 영역에 대하여는 그리드의 간격을 작게 생성하고, 산화막 성장의 계산 시간의 감소를 위하여 산화에 거의 영향을 미치지 않는 실리콘의 아래 영역에 대한 노드의 제거가 이루어졌음을 볼 수 있다. 제 6 도에서는 산화막이 성장하면서 산화막 내부에 새로운 노드들이 생성되었음을 보여주고 있으며, 산화가 더 진행되면, 산화막의 경계와 만나게 되는 실리콘 영역의 노드들이 제거되게 된다.

IV. 결론

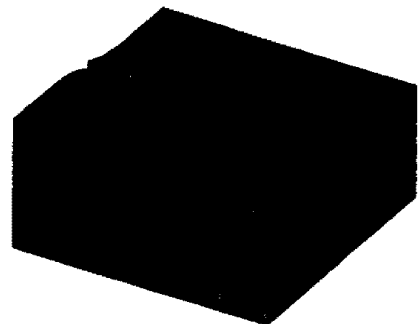
차세대 반도체 소자의 제작에 있어서 핵심 단위 공정인 열산화 공정을 모의 실험하기 위한 3차원 산화 시뮬레이터의 전처리기인 3차원 메쉬 생성기를 제작하였다. 제작된 메쉬 생성기는 산화막의 3차원적인 형상을 시뮬레이션하기에 적합하며, 사용 메모리의 방대한 증가를 막는 노드 제거 알고리즘과, 산화막의 성장에 따른 오차를 줄이기 위한 새로운 노드의 생성 알고리즘이 개발되었다. 따라서, 유한요소법을 사용한 스트레스 의존 3차

원 열산화 시뮬레이션을 통하여 초미세 소자의 제작시 산화막의 3차원적인 형상을 정확하게 예측할 수 있으리라 기대된다.

본 과제는 과학 재단 94-08-00-01-2, 산학 협동 재단 및 차세대 반도체 기반 기술 사업의 지원으로 수행되었다.



제 5 도 Island 구조의 산화막 성장을 위한 초기 구조



제 6 도 Island 구조의 산화막 성장에 따른 메쉬의 이동과 생성

참고문헌

[1] Hiroyuki Umimoto, Shinji Odanaka, "Three- Dimensional Numerical Simulation of Local Oxidation of Silicon," IEEE Trans. Electron Devices, Vol. 38, No. 3, pp. 505-511, 1991.

[2] 원태영, "VLSI 공정 SIMULATION," 반도출판사, 1994.