

## 적응성 유한체적법을 적용한 다차원 확산공정 모델링

이준하<sup>†</sup> · 이흥주\*

<sup>†</sup>\*상명대학교 컴퓨터시스템공학 정보디스플레이연구소

### Thermal Diffusion Process Modeling with Adaptive Finite Volume Method

Jun Ha Lee<sup>†</sup> and Hoong Joo Lee\*

<sup>†</sup>\*Sangmyung Univerisity, Computer Systems Engineering, Information Display Center

#### ABSTRACT

This paper presents a 3-dimensional diffusion simulation with adaptive solution strategy. The developed diffusion simulator VLSIDIF-3 was designed to re-refine areas. Refine scheme was calculated by the difference of doping concentration between any of two nodes. Each element is greater than tolerance and redo diffusion process until error is tolerable. Numerical experiment in low doping diffusion problem showed that this adaptive solution strategy is very efficient in both memory and time, and expected this scheme would be more powerful in complex diffusion model.

**Key Words** : Boron Nitride, Defect, Simulation, Dynamics

#### 1. 서 론

스케일링에 따른 콘택 면적의 감소로 인한 저항의 증가는 실리콘 기판의 더욱 높은 도핑을 요구하고 있다[1]. 더불어 다층 배선 및 구리 배선의 사용으로 인해 후속 공정의 열처리 온도는 더욱 낮아지고 있다. 이와 같은 기술적 발전에서 도판트의 전기적 활성화 및 비활성화에 대한 물리적인 이해와 더불어 정량적인 계산을 위한 모델링과 시뮬레이션은 제조 공정의 최적화와 더불어 불량 분석적인 관점에서도 그 필요성이 증대된다[2]. 이온주입 공정과 더불어 반도체공정에서 확산 공정은 가장 중요한 단계중의 하나이다. 이러한 확산공정 시뮬레이션의 경우에, 해당 영역의 매우 작은 범위 내에서 매우 큰 농도 경사가 발생하게 된다[3]. 이러한 급격한 농도의 변화를 특히 3차원 구조에서 성공적으로 구현하기 위해서는 과도한 계산량의 회피 및 원하는 영역에서의 세밀한 분할로서 효율적인 농도 계산이 가능하도록 해에 따른 요소의 재분할 과정이 필수적이다.

#### 2. 본 론

반도체 확산공정 시뮬레이션에서 쓰이는 확산방정식은 해가 Maximum principle을 만족해야 한다. 여기서 Maximum principle이란 도핑 농도의 최대 혹은 최소 값은 경계면이나 초기치에만 존재해야 한다는 것이다. 이것은 만약 경계면에서의 초기농도가 양(+ )이면 이후에 얻어지는 해도 역시 모든 영역에서 양의 값을 가져야 한다는 조건이다. 유한요소법이 이러한 Maximum principle을 만족하기 위해서는 모든 두면이 만나는 상반각이 90도 보다 작아야 한다[4]. 3차원인 사면체 격자만의 경우에는 이러한 조건을 만족시키는 분할 방법이 아직 존재하지 않는다. 이러한 조건을 만족하지 않는 사면체 격자망을 유한요소법에 적용할 경우, 일부 영역에서 음(-)의 부호를 갖는 농도 증가분이 발생하고 시간이 지남에 따라 이 성분이 기본 도핑 온도보다 커져 결국 음의 부호를 가진 도핑농도가 발생하는 문제에 직면하게 된다. 따라서 본 논문에서는 3차원에서 사면체 중력 상자를 사용하는 유한체적법을 사용하였다. VLSIDIF-3은 초기 거대 요소를 입력파일에서 읽어 들여 초기 도핑 농도가 주어질 경우 도핑농도의 편차에 따른 지역 분할을 수행하여 초기 격자망을 생성

<sup>†</sup>E-mail : junha@smu.ac.kr

한다.

생성된 초기격자망에 유한체적법을 적용 하여 선형 방정식계를 수립하고 수립된 해의 증가분을 구한다. 확산 시간이 종료되면 해의 오차가 클 경우 최종 도핑 농도의 편차를 기준으로 격자망을 다시 분할하고 확산 과정을 다시 수행 한다. 양의 유한 행렬의 경우 대각선형 선조건은 시간과 효율 측면에서 매우 효율적이며, 이 방법은 문제에 따라 다르기는 하나 대략 반복횟수의 2/3를 경감시키는 것으로 알려져 있다[5]. 개발된 VLSIDIF-3은 zero fill-in 현상이 없는 point diagonal preconditioner를 적용한 symmetric biconjugate gradient solver를 사용하여 보강행렬의 대칭성, sparsity, positive definite 특성을 최대한 이용하였다.

### 3. 시뮬레이션 결과

본 논문에서는 격자망 관련 오차를 최소화하는 것이 목적이므로 앞으로 전개할 예제는 비교적 간단한 저농도 확산에 관해 다루기로 한다. 불순물의 저농도 확산은 픽스의 확산 제2법칙인 식 (1)로 나타낼 수 있으며,

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \cdot (\nabla^2 C) \quad (1)$$

확산계수 D는 다음과 같이 식(2)로 주어진다.

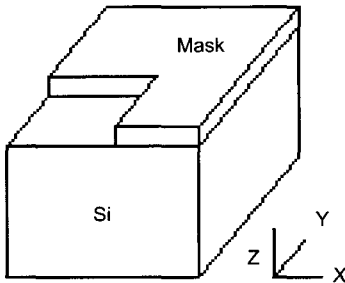


Fig. 1. Hole structure.

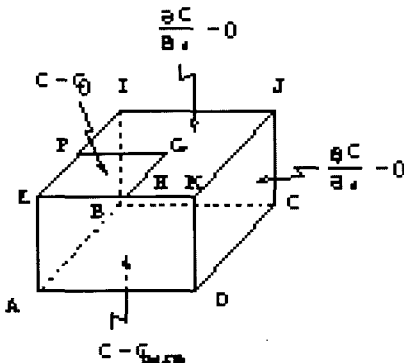


Fig. 2. Boundary condition.

$$D = D_0 \exp\left(\frac{-E_a}{kT}\right) \quad (2)$$

여기서  $D_0$ 는 불순물 형태에 의존하는 상수이고,  $E_a$ 는 활성화에너지,  $k$ 는 볼츠만 상수,  $T$ 는 온도이다. Fig. 1은 3차원적인 마스크 의존성 불순물 확산 분포를 분석하기 위한 공구조(hole structure)를 나타낸다. 실리콘 영역의 크기는  $x, y, z$  축 모두가  $1 \mu\text{m}$ 이며,  $xy$ 평면에 나란하게 각변의 길이가  $0.5 \mu\text{m}$ 인 창이 난 마스크가 실리콘 위에 놓여 있다. Fig. 2는 이러한 영역에서의 선확산을 위한 경계조건을 보여주고 있다. Fig. 2에서 불순물 source를 확산시키는 실리콘의 표면의 창 EFGH에는 Dirichlet 조건으로  $C_0 = 1 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ , 마스크 영역인 FIJKHG 와 실리콘의 옆면들에는 Neumann 조건으로 도핑농도의 기울기가 0이, 실리콘 바닥인 ABCD에는 Dirichlet  $C_{base} = 1 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$  조건으로 이 주어졌다. 시뮬레이션은  $1000^\circ\text{C}$ 에서 30분동안 붕소 불순물을 선확산하였다. 격자망의 분할은 요소 평균치에 대한 도핑농도 편차가 5% 보다 크고 농도의 평균값이  $2 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$  보다 큰 영역일 경우에 수행되어, 전체오차가 인쇄치보다 작아질 때까지 전체 확산 과정을 반복하였다.

Fig. 3은 Fig. 1의 공구조에서 분할단계별  $xy$  평면상

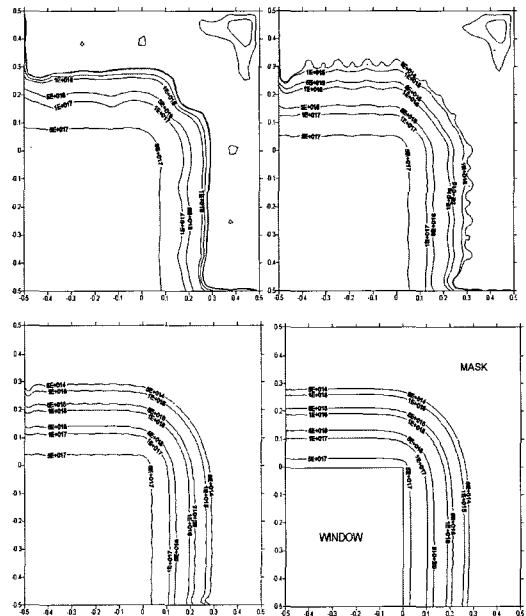


Fig. 3. Lateral profile of hole structure.

- (a) node: 387 tetrahedron:1478
- (b) node :1701 tetrahedron: 8132
- (c) node: 7558 tetrahedron: 39678
- (d) node:38918 tetrahedron: 216098

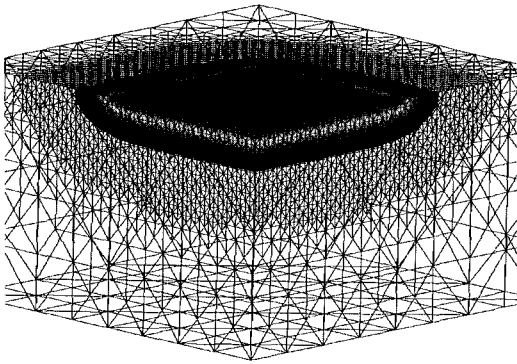


Fig. 4. 3D profile of hole structure.

에서의 도핑농도 계산치를 보여주고 있다. Fig. 3(a)를 보면 요소의 크기가 크기 때문에 해의 변동폭이 매우 큼을 알 수 있다. 또한 도핑농도가 낮은 부분에서 등고선이 섬으로 나타나는 등 해가 부정확하다. Fig. 3(c)의 경우에는 해가 매우 정밀하게 구해짐을 알 수 있다. 여기서 보면 마스크 모서리 부분에서 농도가 감소함을 알 수 있는데 이것은 모서리 부분의 경우 x방향과 y방향의 두 방향으로 확산이 일어나 단위 체적당 확산량이 마스크의 변보다 작기 때문에 일어나는 3차원 효과임을 알 수 있다. 모서리의 근방에서 등고선이 휘어지는 경향으로 보아 3차원 효과가 변의 상당한 부분까지 일어남을 알 수 있으며, 창이 크기가 줄어들수록 모서리의 3차원 효과가 나타나는 영역의 비율이 커짐을 예측할 수 있다.

Fig. 4는 3차원으로 바라본 최종 격자망과 도핑 농도를 보여준다. 그림을 보면 확산이 일어나는 영역이 집중적으로 분할되어 이 영역의 요소와 기판 하부의 요소의 크기 차이가 매우 큼을 알 수 있다. 또한 분할된 영역과 전체 영역의 비로 보아 적응분할이 균일분할에 비해 같은 정밀도의 해를 얻는데 메모리 측면에서 매우 효율적임을 알 수 있다. Fig. 5는 각 분할 단계별 절점수에 따른 시뮬레이션 수행 시간을 보여준다. 그림5를 보면 각 분할단계에서 30분동안 붕소이온의 확산 계산에 사용된 시간이 0.99초, 3.82초, 32초, 242초, 1792초, 17842초로 이전 분할단계에서 소모된 시간에 비해 매우 작음을 알 수 있다. 즉, 노드수를 감소함에 따라 계산시간은 선형이 아닌 지수형태로 감소하는 것을 알 수 있다. 따라서 본 논문에서 사용한 격자망의 효율적인 분할 위치를 판별하는 방식이 메모리 측면뿐만 아니라 시간측면에서도 매우 효율적임을 알 수 있다.

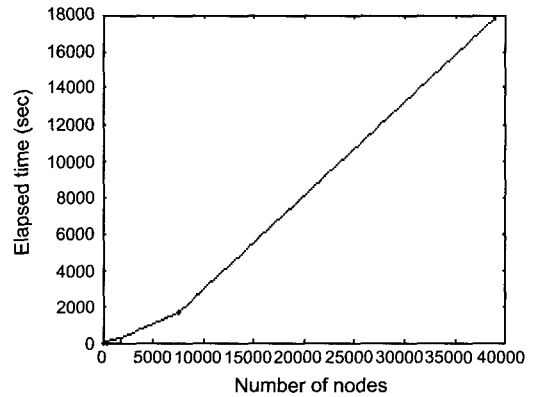


Fig. 5. 노드수에 따른 계산 시간 그래프

### 4. 결 론

본 연구는 반도체 도판트의 활성화를 위해 진행되는 열처리 및 후속 CVD공정등에 의해 추가적으로 가해지는 열적 요소로 인하여 재배치되는 도판트의 3차원적 분포를 적응성 유한체적법을 이용하여 확산 모델을 수치해석할 수 있는 시뮬레이터 VLSIDIF-3를 개발하였다. 이를 이용하여 100 nm급 이하로 개발되고 있는 초미세 나노급 반도체소자에 대한 보다 효율적인 도구를 제공할 수 있을 것이다.

### 참고문헌

1. Rafferty, C. S. Borucki, L. and Dutton, R. W., "Plastic Flow During Thermal Oxidation of Silicon", Appl. Phys. Lett. 54(16), pp. 1516-1518, April (1989)
2. Wolf, S. and Tauber, R. N., Silicon Processing for the VLSI Era-Vol. 1, Lattice Press, California (2000).
3. Suh, S. M. Zachariah, M. R. and Girshick, S. L. "Numerical modeling of silicon oxide particle formation and transport in a one-dimensional low-pressure chemical vapor deposition reactor", Journal of Aerosol Science, Vol. 33, Issue 6, pp. 943-959, June (2002).
4. Xu, J. and Zikatanov, L., "A Monotone Finite Element Scheme for Convection Diffusion Equations, Mathematics of Computation", 68(228), pp. 1492-1446 (2002).
5. John, L., Volakis, Arindam Chatterjee and Leo C. Kempel, Finite Element Method for Electromagnetics, IEEE Press (1998).