

〈論 文〉

급속 열처리시 실리콘 웨이퍼의 온도분포와 슬립 현상의 해석

이 혁* · 유영돈* · 엄윤용* · 신현동* · 김충기**

(1991년 8월 14일 접수)

Analysis of Temperature Distribution and Slip in Rapid Thermal Processing

Hyouk Lee, Young Don Yoo, Hyun Dong Shin, Youn-Young Earmme
and Choong-Ki Kim

Key Words: Rapid Thermal Processing(급속 열처리 공정), Silicon Wafer(실리콘 웨이퍼), Heat Transfer(열전달), Heating Rate(가열 속도), Slip(슬립), Slip Propagation(슬립 진전).

Abstract

A numerical solution of temperature and thermally induced stress in a wafer during rapid thermal processing(R.T.P) is obtained, and an analysis of onset and propagation of slip is performed and compared with experiment. In order to calculate temperature distribution of a wafer in R.T.P system, heat conduction equation that incorporated with radiative and convective heat transfer model is solved, and the solution of the equation is calculated numerically using alternating direction implicit(A.D.I) method. In dealing with radiative heat transfer, a partially transparent body that absorbs the radiation energy is assumed and this transparent body undergoes multiple internal reflections and absorptions. Two dimensional (assuming plane stress) thermoelastic constitutive equation is used to calculate thermal stress induced in a wafer and finite element method is employed to solve the equation numerically. The stress resolved in the slip directions on the slip planes of silicon is compared with the yield stress of silicon in order to predict the slip. The result of the analysis shows that the wafer temperature at which slip occurs is affected by the heating rate of the R.T.P system. It is observed that once slip occurs in the wafer, the slip grows.

기 호 설 명

- $B_i(\lambda)$: 복사 에너지 밀도
- B_0 : 전이의 이동도(mobility of dislocation)
- C : 물질 상수
- C_{ijkl} : 탄성 계수
- d : 웨이퍼 두께

- \dot{D} : 열확산도
- E : Young 계수
- $e_{\omega}(\lambda)$: 스펙트럼 방출력(spectral emissive power)
- $f dE_{j-i}$: 형상 계수(configuration factor)
- h : 대류 열전달 계수(convective heat transfer coefficient)
- $H_i(\lambda)$: 복사 에너지 밀도(radiation energy den

*정회원, 한국과학기술원 기계공학과
**정회원, 한국과학기술원 전기 및 전자공학과

	sity)
k	: 열전도도,
K	: Boltzmann 상수
n	: 물질 상수
\overline{Nu}	: Nusselt number
Pr	: Prandtl number
q_r	: 진복사 열유속 (net radiative heat flux)
Q	: Peierls potential
$R_i (i=1, \dots, 6)$: 분해전단응력
$R^*(\lambda)$: 겉보기 반사도 (apparent reflectivity)
R_a	: Rayleigh number
$S_i (i=1, \dots, 5)$: 분해전단응력
$T^*(\lambda) H_i(\lambda)$: i 포면 요소를 투과하는 복사에너지 밀도
$T^*(\lambda)$: 겉보기 투과도 (apparent transmissivity)
T	: 온도
T_o	: 기준 상태의 온도
U	: 미끄러짐에 대한 활성화 에너지.
v	: 전위의 진전속도
α_{ij}	: 흡수 계수 (absorption coefficient)
β_{ij}	: 열계수 (thermal modulus)
$\epsilon^*(\lambda)$: 겉보기 방사도 (apparent emissivity)
ϵ	: 변형률
$\dot{\epsilon}$: 변형률 속도
λ	: 빛의 파장
ν	: Poisson 비
ρ	: 참반사도
σ	: 외부 응력
σ_y	: 항복 응력
σ_o	: 기준 응력
τ	: 투과도

1. 서 론

최근 반도체 소자는 고집적화를 통해서 그 크기를 줄이려는 노력이 계속되고 있다. 반도체 소자의 크기가 작아짐에 따라 구조는 더욱 복잡해지고 이를 위해 회로는 횡적 수직적으로 크기가 줄어들 필요성이 생기게 되었다. 단결정의 반도체안에 불순물(dopant)을 침투시켜 전자회로를 구성하는 반도체 집적회로에서 소자의 크기를 줄이려면, 스케일 법칙(scaling law)⁽¹⁾에 따라 접합의 깊이도 줄어들어야 한다. 반도체 집적회로 제조공정에서 실리콘

에 주입된 불순물이 실리콘의 격자(substitutional site)에 자리잡도록 하여 반도체가 전자소자로서의 고유 기능을 수행하도록 하고, 이온 주입시 실리콘 격자에 발생한 결함 등을 제거하기 위해서는 적당한 열처리 공정이 필요하며, 초미세 전기소자에서 게이트(gate) 전극의 접촉과 상호연결배선을 위해 필요한 낮은 저항률을 갖는 실리사이드(silicide)의 형성, 소자간의 전기적 접촉, 칩과 외부 패키지(package)의 연결을 위한 금속합금(metal alloy) 공정등의 여러 공정에서도 열처리 공정이 필요하다.

기존의 노(furnace)를 이용한 열처리 공정의 경우, 열처리 온도가 낮고 열처리 시간이 수십분 정도이므로, 불순물의 확산공정에서는 불순물의 확산 깊이가 깊어져서 얇은 접합을 얻기가 힘들고, 그 농도분포를 조절하기도 어렵다. 또한 소자간의 전기적 접촉을 위해 알미늄 박막을 증착시키는 금속합금공정에서는 얇은 접합을 갖는 반도체 소자의 경우에 알미늄과 실리콘의 접촉 부분에서 알미늄의 입계(grain boundary)를 따라 실리콘 원자들이 이동하고, 이동된 실리콘의 빈자리에 알미늄이 채워져서 알미늄의 접합이 파괴되는 정션스파이크(junction spike) 현상과 알미늄과 실리콘의 열팽창 계수의 큰 차이에 의해 $1\mu\text{m}$ 의 두께를 갖는 금속 박막에 수 μm 의 작은 돌기가 생기는 힐록(Hillock) 현상이 생기며, 이때의 힐록은 다층금속 공정 수행시 필요한 층간의 절연물을 뚫고 나와 원하지 않는 단락을 유발하게 된다. 이와 같은 문제를 해결하고 회로의 고집적화를 이루기위한 열처리 방법으로 1000°C 이상의 고온에서 수십초 가열하는 급속 열처리 공정(rapid thermal processing, RTP)를 도입한 열처리 방식이 고안되었는데, 이 급속 열처리 공정은 실리콘에 주입된 불순물의 확산시간을 줄여 얇은 확산 깊이를 얻을 수 있고 열처리 시간과 온도를 정밀하게 조절할 수 있으며, 티타늄 실리사이드를 형성하는 경우 티타늄과 산소의 반응시간을 줄여 전기적 특성이 좋은 실리사이드를 형성할 수 있다. 또한 금속합금 공정에서도 공정시간을 짧게해 알미늄과 실리콘의 상호 반응시간을 줄임으로써 정션스파이크 현상과 힐록 현상을 줄일 수 있음이 확인되었다⁽¹⁾. 그러나 급속 열처리 공정은 웨이퍼를 순간적으로 고온으로 가열하므로 웨이퍼의 온도가 불균일하게 되어 이로 인한 열응력이 발생하고, 온도가 상승하면서 실리콘

의 항복응력이 급격히 떨어지므로 고온에서는 웨이퍼내의 온도구배가 작은 경우에도 웨이퍼에 소성 변형이 일어나면서 슬립(slip)이 생기게 된다. 웨이퍼에 발생한 슬립은 불순물을 원하지 않는 부분에 위치시키고 전이 증식의 소스(source)로 작용하며, 전자의 원활한 흐름을 방해하므로 슬립이 일어난 부분에 만들어진 반도체 소자는 그 기능을 제대로 수행할 수가 없다⁽²⁾. 따라서 슬립 현상은 생산 공정에서 웨이퍼당 반도체 소자의 수율을 떨어뜨려 급속 열처리 공정이 생산공정에 도입되는 것을 막는 가장 중요한 요소가 되고 있으며, 급속 열처리 공정에서는 웨이퍼의 온도를 균일하게 유지해주는 것이 매우 중요하게 된다. 웨이퍼상의 온도 불균일은 웨이퍼에 도달하는 빛에너지가 불균일할때도 나타나지만, 웨이퍼에 도달하는 빛에너지가 완전히 균일한 경우에도 웨이퍼 가장자리에서의 복사 열손실에 의해 나타나게 된다. 주로 반경 방향의 온도 구배로 인해 발생하는 열응력은 웨이퍼의 내부에는 압축응력이, 가장자리부근에는 인장응력이 걸리며, 온도구배가 가장 큰 가장자리 부근에서 인장응력에 의해 슬립이 발생되기 쉽다. 이러한 슬립은 웨이퍼에 발생한 열응력중 실리콘 결정의 슬립면인 {111}면의 슬립방향 <110>방향 성분이 실리콘 고유의 항복 응력값을 넘어설 때 일어나며⁽³⁾, 이 때 실리콘 웨이퍼의 항복 응력은 온도와 변형률, 그리고 웨이퍼에 존재하는 초기 전위 밀도의 함수이다⁽⁴⁾. 급속 열처리 공정에서의 웨이퍼의 온도분포와 열응력의 해석, 그리고 열응력에 의해 웨이퍼에 나타나는 슬립현상에 대해 많은 연구가 이루어졌는데, Bentini⁽⁵⁾는 정상 상태에서의 웨이퍼내의 축대칭 1차원 온도분포와 열응력의 해석해를 구하고, 이를 실리콘의 항복 응력과 비교하여 슬립이 생기는 온도 범위를 제시하였고, Ritz⁽⁶⁾는 실험에 의해서 슬립이 생기는 온도 범위를 측정하고, 웨이퍼가 고온에서 일정하게 유지될 때 슬립의 길이가 시간에 따라 증가하는 현상을 관찰하였다. Lord⁽⁶⁾는 열처리 공정중 시간에 따라 변하는 웨이퍼 온도와 열응력을 계산하고, 웨이퍼의 둘레에 환형의 평면 차폐물을 두어 가장자리에서의 온도 손실을 줄여 슬립 발생을 억제하는 방법을 제안하였고, Young⁽⁷⁾은 입체 차폐물의 반사각도에 따라 변하는 웨이퍼내의 온도분포와 열응력을 계산하였다. Moslehi⁽⁸⁾는 가열속도와 냉각속도를 조절하여 슬립의 발생을 줄일 수 있는 방법을 제안하였다. 그러나 위의 연구 결과들은 실

리콘 웨이퍼가 등방성(isotropy)을 가지고 웨이퍼의 온도 분포는 축대칭(axi-symmetry)이라는 가정하에 해석을 하였으며, 원형 막대 형상의 램프가 평행하게 배열되어 있는 일반적인 급속 열처리 장치의 특성상 원주방향으로 발생하는 웨이퍼의 온도 구배는 고려하지 않았다. 그러나, 램프의 갯수에 따라 달라지는 웨이퍼의 온도분포와 원주방향의 온도구배를 정확히 고려하여 열처리 장치를 설계하기 위해서는 2차원 모델을 이용하여 해석할 필요가 있다.

본 연구에서는 텅스텐 할로겐 램프를 이용한 급속 열처리 장치로 웨이퍼를 가열할 때 시간에 따라 변하는 웨이퍼의 2차원 온도 분포와 온도 구배에 의해 발생하는 열응력을 실리콘 웨이퍼의 결정방향에 따라 다른 값을 갖는 탄성계수를 고려하여 계산하고, 슬립의 발생 시기, 웨이퍼의 가열속도와 슬립량의 관계, 그리고 웨이퍼에 발생한 슬립의 진전 특성에 대하여 살펴보고 실험결과와 비교하였다.

2. 온도 분포 해석

실리콘 웨이퍼에 필요한 박막을 증착 시키는 방법중의 하나인 급속 열처리 시스템에서 열처리시 균일한 박막 두께를 얻고 실리콘 웨이퍼의 가장자리에 주로 생기는 슬립을 방지하기 위해서는 웨이퍼 내의 온도분포 예측이 필수적이다. 본 연구에서는 현재 KAIST 전기및 전자 공학과에 설치된 급속 열처리 시스템에 대하여 해석을 실시하였다.

이 급속열처리 시스템의 구조는 그림 1(a)에 나

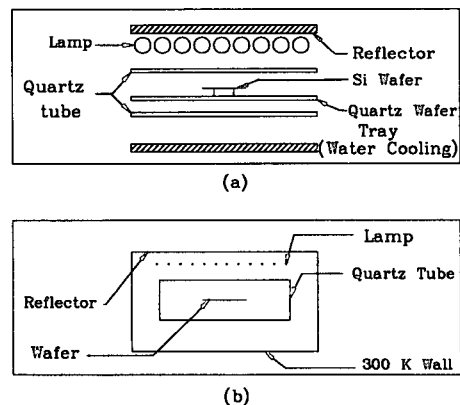


Fig. 1 (a) Schematic diagram of R.T.P system (b) Model

타내었다. 이 시스템은 열처리시 주위로부터의 오염을 방지하기 위하여 직사각형 석영관으로 제작된 열처리 챔버(processing chamber), 열원인 텅스텐 할로겐 램프, 웨이퍼를 열처리 챔버로 실어나르는 웨이퍼 트레이(wafer tray), 냉각 장치, 그리고 열원인 텅스텐 할로겐 램프에서 방출되는 복사 에너지를 웨이퍼의 표면에 집중 시키기 위해 텅스텐 할로겐 램프의 윗면에 설치된 알루미늄 반사경으로 구성 되어 있다. 이 때 웨이퍼는 웨이퍼 트레이위에 석영핀(quartz pin)으로 지지하였다. 이와 같은 실제 시스템에서 열처리시 웨이퍼 내의 온도 분포를 예측하기 위하여 그림 1(b)와 같은 2차원 급속 열처리 시스템의 계산 모델을 채택하였다.

2.1 열전달 해석

웨이퍼 내에서와 그 주위에서 일어나는 열전달 기구는 웨이퍼 내의 온도 기울기에 의한 열전도와 열처리시 사용된 주위 gas와 관련된 열대류, 그리고 웨이퍼와 텅스텐 할로겐 램프 사이의 열복사로 크게 나눌 수 있다. 먼저, 웨이퍼와 그 주위에서 일어나는 열전달 기구에 대한 몇가지 가정의 도입이 필요하다.

- (1) 급속 열처리 시스템의 벽과 석영관, 그리고 알루미늄 반사경은 회색체이다.
- (2) 웨이퍼 표면은 열복사에너지를 균일하게 난반사(diffuse reflection)한다.
- (3) 웨이퍼 표면은 열복사에너지를 균일하게 난반사(diffuse reflection)한다.
- (4) 웨이퍼 두께 방향의 온도 구배는 무시한다.
- (5) 웨이퍼 표면에 도달한 열복사에너지는 웨이퍼의 내부로 수직하게 흡수된다.

위의 가정을 바탕으로 웨이퍼의 미소 체적 요소에 에너지 균형을 취함으로써 계의 온도 분포를 지배하는 편미분 방정식을 얻는다.

$$\frac{1}{D} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \frac{\partial T}{\partial r} \right] + \frac{1}{1} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\frac{1}{1} \frac{\partial T}{\partial \theta} \right] + \frac{q_r}{kd} \frac{h(T - T_a)}{kd}, \quad (1)$$

여기서 D, d, q_r, k, h 는 각각 실리콘의 열확산도, 웨이퍼의 두께, 진복사 열유속(net radiative heat flux), 실리콘의 열전도도, 그리고 대류 열전달 계수(convective heat transfer coefficient)를 나타낸다. 이 방정식의 수치해를 얻기 위하여 진복사 열

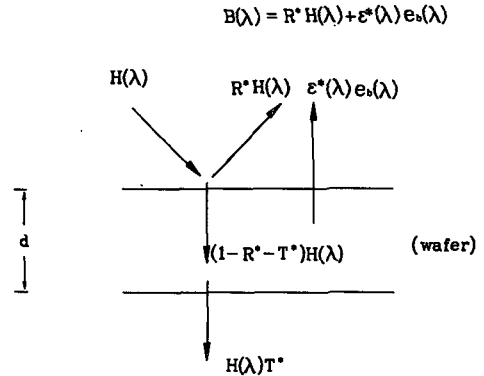


Fig. 2 Radiative heat transfer model of a wafer

유속 항과 대류 열전도 계수 항에 대한 고찰이 필요하다. 먼저, 진복사 열유속 q_r 를 구하기 위하여 Fig. 2와 같은 복사 열전달 모델을 생각한다. 실리콘 웨이퍼의 다른 면을 통하여 투과되고 또 일부는 웨이퍼의 내부로 재반사가 일어난다. 이 때 웨이퍼의 표면 i 요소에 도달하는 복사 에너지 밀도(radiation energy density), $H_i(\lambda)$ 는 다음과 같이 정의된다.

$$H_i(\lambda) = \sum_j \tau_{qj} e_{bj}(\lambda) A_j \int dE_{j-i} / A_i, \quad (2)$$

여기서 첨자 j 는 램프의 요소를 나타내고, λ 는 빛의 파장, τ_{qj} 는 석영의 투과도로 $3.5 \mu m$ 이하의 λ 에 대해서는 그 값이 0.85로 일정하다는 연구결과⁽⁹⁾로부터 상수로 취급하였다. 텅스텐 할로겐 램프에서 나오는 빛의 파장은 $0.4 \sim 4 \mu m$ 이다⁽¹⁾. $e_{bj}(\lambda)$, A_j 는 각각 텅스텐 할로겐 램프의 스펙트럴 방출력(spectral emissive power), 웨이퍼 표면 i 의 면적 요소, 램프의 표면 j 의 면적 요소를 나타내며, $\int dE_{j+i}$ 는 램프에서 방출된 복사 에너지 중 웨이퍼 임의의 위치에 도달되는 복사 에너지의 비를 나타내는 형상 계수(configuration factor)⁽¹⁰⁾이다. 이 때 dE_{j-i} 는 램프에서 방출된 복사에너지 중 직접 웨이퍼에 도달하는 에너지의 비 dE_{j-i} 와 알루미늄 반사경에 반사되어 웨이퍼 표면에 도달하는 에너지의 비 $\rho_r dE_{j-i}$ 의 합이다. 여기서 ρ_r 은 알루미늄 반사경의 반사도를 나타낸다.

웨이퍼의 표면 i 요소에서 방출되는 복사 에너지 밀도인 $B_i(\lambda)$ 는 다음과 같다.

$$B_i(\lambda) = R^*(\lambda) H_i(\lambda) + \varepsilon^*(\lambda) e_{bi}(\lambda) \quad (3)$$

$R^*(\lambda)$ 는 겉보기 반사도(apparent reflectivity)로 임의의 파장에서 웨이퍼 표면으로부터 반사되는 총복사 에너지와 웨이퍼 표면에 입사되는 에너지의 비를 나타내고, $\epsilon^*(\lambda)$ 는 겉보기 방사도(apparent emissivity)를 나타낸다. i 표면 요소를 투과하는 복사에너지 밀도는 $T^*(\lambda)H_i(\lambda)$ 로 나타낸다. 여기서 $T^*(\lambda)$ 는 겉보기 투과도로 임의의 파장에서 투과되는 총복사 에너지와 웨이퍼 표면에 입사되는 에너지의 비이다. 그러므로 i 표면 요소에서 진복사 열유속(total net radiative heat flux, q_r)은 다음과 같다.

$$q_r = \sum_{\lambda} \{ [1 - R^*(\lambda) - T^*(\lambda)] H_i(\lambda) - \epsilon^*(\lambda) e_{bi}(\lambda) \} \Delta\lambda \quad (4)$$

대류 열전달 계수(convective heat transfer coefficient)에 대한 항을 고찰하기 위하여 먼저, 웨이퍼 주위의 유동에 대한 고려가 필요하다. 열처리시 웨이퍼와 그 주위의 가스와의 유동은 아직 정확히 알 수 없으나, Lord⁽⁶⁾ 등의 결과에서 보면 웨이퍼와 그 주위의 유동은 자연 대류가 지배하며, 웨이퍼 윗면과 아랫면, 그리고 끝면(edge)에서의 대류 열전달 계수의 값은 웨이퍼와 그 주위의 온도 영향을 고려하지 않았을 때 10~40W/m²K범위를 알 수 있다. 본 연구에서는 웨이퍼면과 끝면에서의 열전달 계수값을 온도에 따라 실험적으로 구한 결과를 이용하였다^(11,12). 즉 웨이퍼면에서는

$$\bar{N}_u = 0.54 R_a^{0.25} \quad (5)$$

웨이퍼의 끝면에서는

$$\bar{N}_u^{0.5} = 0.825 + \frac{0.387 R_a^{1/6}}{\left[1 + \left(\frac{0.492}{Pr} \right)^{9/16} \right]^{(8/27)}}, \quad (6)$$

여기서 \bar{N}_u 는 Nusselt number, R_a 는 Rayleigh number, Pr 은 Prandtl number를 나타낸다.

식(1)을 계산하기 위하여 필요한 열물성치는 열전도도 k 와 열확산계수 D 이다. 이 들 값들은 온도와 파장에 대한 함수이므로 본 연구에서는 실험치로부터 구한 이들 자료^(13,14)를 다항식으로 표현하여 계산에 이용하였다. 그리고 광학 물성치인 겉보기 투과도(apparent transmissivity, $T^*(\lambda)$)와 겉보기 반사도(apparent reflectivity, $R^*(\lambda)$), 그리고 방사도(apparent emissivity, $\epsilon^*(\lambda)$)는 다음과 같이 실리콘의 참반사도와, 참투과도의 함수로 나타낼 수 있다^(15,16).

$$\begin{aligned} R^* &= \rho \left[1 + \frac{(1-\rho)^2 \tau^2}{1 - \rho \tau^2} \right], \\ T^* &= \frac{(1-\rho)^2 \tau}{1 - \rho \tau^2}, \\ \epsilon^* &= \frac{(1-\rho)(1-\tau)}{1 - \rho \tau}. \end{aligned} \quad (7)$$

따라서 계산에 필요한 겉보기 광학 물성치를 얻기 위해서는 실리콘 웨이퍼에 대한 참투과도와 참반사도를 구하여야 한다. 참투과도 τ 는 입사된 복사에너지가 웨이퍼에 수직하게 흡수된다는 것으로 가정할때 $\exp(-ad)$ 이므로 흡수 계수(absorption coefficient, a)만 알면 구할 수 있다. 본 연구에서는 Fig. 3(a)에 나타낸 흡수계수⁽¹⁷⁾를 온도와 파장 별로 다항식을 구하여 계산에 이용하였다. 그리고 참반사도 ρ 에 대한 온도와 파장에 대한 자료를 구할수 없어서 불투명 실리콘에 대한 방사 계수(emissivity)⁽¹⁸⁾값을 이용하여 구하였다. 즉 불투명한 물질에 대해 키르히호프 법칙(Kirchhoff's law)

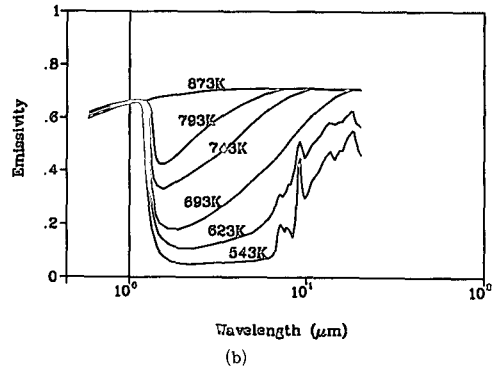
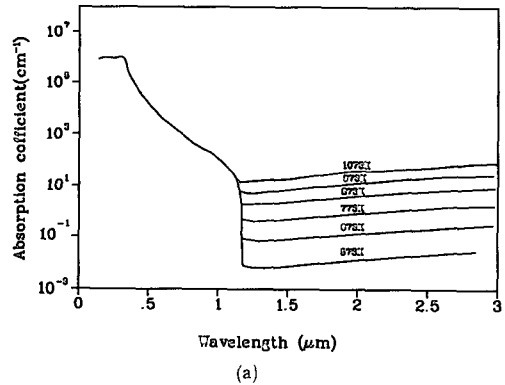


Fig. 3 (a) Absorption coefficient $a(\lambda)$ as a function of wavelength⁽¹⁸⁾
(b) Emissivity $\epsilon(\lambda)$ as a function of wavelength⁽¹⁷⁾

을 적용하면 $\rho=1-\varepsilon$ 이므로 참반사도를 구할 수 있다. Fig. 3(b)에 계산에 이용한 방사 계수⁽¹⁸⁾를 온도와 파장에 대하여 나타내었다.

2.2 수치 해석

방정식(1)의 수치해를 얻기 위하여 유한 차분법(Finite Difference Method, F.D.M.)의 방법 가운데 A.D.I.(Alternating Direction Implicit) 방법을 이용하였다⁽¹⁹⁾.

초기 조건 : $T = T_0$ at $t=0$. (8)

경계 조건 :

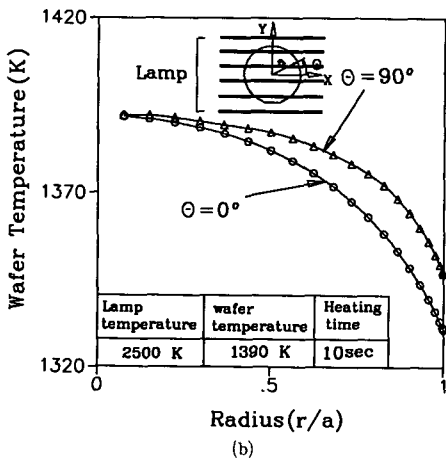
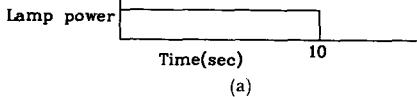
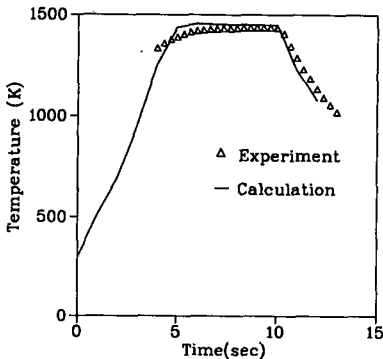


Fig. 4 (a) Temperature at the center of 3" wafer lamp holding time $t=10\text{sec}$
 (b) Comparison of temperatures at different positions in a wafer ($t=10\text{sec}$, $\theta=0^\circ$ and $\theta=90^\circ$)

$$\frac{\partial T}{\partial \theta} = 0 \quad \text{at } \theta = 0, \pi/2,$$

$$\frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad \text{at } r = 0, \quad (9)$$

$$-k \frac{\partial T}{\partial r} = \varepsilon \sigma T^4 - \sigma T_0^4 \quad \text{at } r = R.$$

Fig. 4(a)은 0-10초 동안 램프를 켜 후 10초 지나서 램프를 껐을 때, 웨이퍼 직경 76.2mm, 두께 0.35mm, 그리고 램프의 발열부 길이 130mm, 램프와 웨이퍼 사이의 거리 26mm에 대해서 웨이퍼 중심부에서의 시간에 따른 온도 분포를 나타낸다. 그림에서 삼각형 표시는 pyrometer를 이용하여 웨이퍼의 중심부의 온도를 측정된 자료이다. Fig. 4(b)는 동일한 조건에서 정상 상태에서의 $\theta=0^\circ, 90^\circ$ 에서의 반경 방향 온도 분포를 나타낸 것이며, 여기서 막대 램프의 기하학적 형상에 의해 θ 값에 따라 웨이퍼의 반경 방향 온도 분포가 달라지는 것을 볼 수 있다.

3. 열응력 해석

온도 $T(r, \theta, t)$ 에 의한 열응력은 준평형 상태를 가정하여 선형 열탄성 이론을 적용할 때 열탄성 재료의 구성방정식인 Duhamel-Neumann 법칙에 의해

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} - \beta_{ij} (T - T_0), \quad (10)$$

로 주어진다. 여기서 C_{ijkl} 은 탄성 계수, β_{ij} 는 열 계수(thermal modulus), T 는 온도, T_0 는 기준 상태의 온도이다. 재료의 온도 분포가 주어졌을 때 재료에 걸리는 열응력을 계산하기 위해서는 재료의 방향에 따른 물성치를 고려하여야 하며, 결정(crystal)에서 독립적인 탄성계수 C_{ijkl} 의 수는 결정이 분자 구조의 대칭성으로 인해 갖는 좌표 변환에 대한 불변성에 의해 정해진다.

본 연구에서는 실리콘 웨이퍼를 입방 대칭성을 가진 탄성 재료로 가정한 경우와 등방성 탄성 재료로 가정한 경우의 두 경우에 대해 열응력 해석을 수행하였다. 면심입방(face centered cubic, FCC) 결정 구조를 갖는 실리콘은 입방 대칭성(cubic symmetry)을 가지므로 독립적인 C_{ijkl} 의 갯수가 3개이고, 열계수 β_{ij} 는 3개의 주응력(principal stress) 방향에 대해 같아 1개이다⁽²⁰⁾. 단결정인 실리콘 웨이퍼를 등방성의 물질로 가정하고 응력을 계산할 경우 Young계수 E 와 Poisson비 ν 가 필요

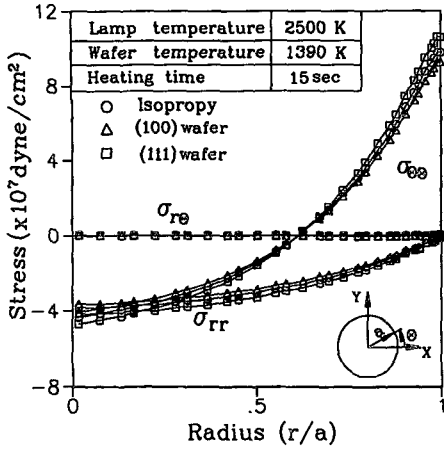


Fig. 5 comparison of computed stresses of isotropic material with those of a cubic symmetric material ($t=10\text{sec}$ and $\theta=0^\circ$)

한데 여기서는 결정의 각 방향 탄성계수의 평균을 취하는 방법인 Voigt평균⁽²¹⁾을 이용하여 실리콘의 3개의 탄성계수의 평균을 취하여 E와 ν 를 구하였다.

웨이퍼에 걸리는 열응력은 r, θ 의 2차원 함수로 나타나는 평면 응력 상태를 가정하고 유한 요소법을 이용하여 구하였으며⁽²²⁾, 웨이퍼의 대칭성을 이용하여 웨이퍼의 1/4면을 해석하였다. 웨이퍼는 각각 (100)웨이퍼, (111)웨이퍼라 불리는 웨이퍼면에 수직인 방향이 [100], [111](밀러 지수(Miller indices)에 의한 표기)인 웨이퍼를 다루었다.

램프의 온도를 2500K로 일정하게 놓고 구한 시간에 따른 웨이퍼 온도에서 웨이퍼 중심부의 온도가 1390K일 때의 온도 분포를 취하여 이로부터 (100)웨이퍼, (111)웨이퍼, 그리고 등방성을 가정한 실리콘 웨이퍼에 생기는 열응력을 계산하여 Fig. 5에 나타냈는데, 여기서 웨이퍼의 이방성을 고려한 응력값과 등방성을 가정한 값의 차이가 크지 않음을 알 수 있다. 이 때 실리콘의 3개의 탄성계수는 $C_{1111}=1.657 \times 10^{12} \text{dyne/cm}^2$, $C_{1122}=0.639 \times 10^{12} \text{dyne/cm}^2$, $C_{1212}=0.796 \times 10^{12} \text{dyne/cm}^2$ 이고⁽²¹⁾, 이로부터 Voigt평균을 이용해 계산한 young계수 E와 Poisson비 ν 의 값은 각각 $1.558 \times 10^{12} \text{dyne/cm}^2$, 0.215이다. 열팽창계수 α 는 2.33×10^{-6} 이다.

4. 슬립 현상 해석

4.1 슬립 발생의 위치와 모양

단결정인 실리콘 웨이퍼에서 소성변형은 온도구

배로부터 계산한 열응력 중 슬립면의 슬립방향 성분이 실리콘의 항복응력보다 클 때 일어난다. 면심입방 결정 구조를 가지는 실리콘 결정의 슬립면은 {111}, 슬립 방향은 $\langle 110 \rangle$ 이다. 실리콘에는 4개의 서로 다른 슬립면이 존재하고 각 면에는 3개의 슬립 방향이 존재해서 슬립 시스템은 모두 12개이지만, 각 슬립 시스템으로의 분해전단응력을 수식화하면 (100)웨이퍼의 경우 5개, (111)웨이퍼에서는 6개의 독립적인 식으로 나타내며⁽²³⁾ 이를 Table 1에 나타내었다.

(100)웨이퍼의 5개의 독립적인 슬립시스템으로의 분해전단응력 $S_i (i=1, \dots, 5)$ 는 웨이퍼내에서의 각도 θ 의 함수이며, θ 값이 변하면서 즉 웨이퍼의 원주를 따라서 가장 큰 응력값을 가지는 슬립 시스템이 바뀌게 된다. 웨이퍼에서 가장 큰 응력이 걸리는 웨이퍼의 끝면인 $r=a$ 에서 θ 에 따라 변하는 분해전단응력 S_i 의 상대적인 크기를 나타낸 것이 Fig. 6이다.

슬립이 웨이퍼면과 평행하지 않은 슬립 시스템에서 일어나면 웨이퍼 표면에 웨이퍼면과 슬립면의 교선인 슬립선이 나타난다. 반면 웨이퍼면과 평행한 슬립 시스템에서 슬립이 일어나면 웨이퍼면과 슬립면이 평행하게 되어 슬립선이 웨이퍼 표면에 나타나지 않게 된다. (100)웨이퍼에서 슬립선과 관계가 있는 슬립 시스템으로의 분해전단응력은 S_2, S_3, S_4, S_5 이며, 이 때 S_2, S_3 는 Y축과 평행한 슬립선을, S_4, S_5 는 X축에 평행한 슬립선을 각각 나타내게 된다. 웨이퍼에 슬립이 일어날 때 Fig.6에 나타난 바와 같이 상대적인 응력 값이 가장 큰 S_5, S_3 에 의해 $\theta=22.5^\circ, \theta=67.5^\circ$ 인 지점에서 가장 먼저 슬립선이 나타나고, 열처리가 끝난 후에 슬립선의 길이가 다른 부분에 비해 길게 나타날 것을 예측할 수 있으며, 이는 (100)웨이퍼에 대한 실험 결과인 Fig. 7과 잘 일치한다. 여기서는 빛의 조사각도에 따라 한정적으로 관찰되는 슬립선을 전부 나타내기 위해 슬립선을 스케치하여 나타내었다.

(111)웨이퍼의 6개의 독립적인 슬립 시스템으로의 분해전단응력 $R_i (i=1, \dots, 6)$ 의 상대적인 크기를 $r=a$ 에서 θ 에 대해 나타낸 것이 Fig. 8이며, 여기서 웨이퍼 표면의 슬립선과 관계가 있는 슬립 시스템으로의 분해전단응력 R_4, R_6, R_5 의 값이 가장 큰 $\theta=-60^\circ, \theta=0^\circ, \theta=60^\circ$ 에서 가장 먼저 슬립선이 나타날 것을 예측할 수 있다. 이 때 R_4, R_5, R_6 는 각각 두개의 슬립면에 존재하는 서로 다른 슬립 시스

Table 1 Resolved shear stresses on the slip systems of (100) and (111) wafer

Slip plane	Slip direction	(100) wafer		(111) wafer	
		Resolved shear stress		Resolved shear stress	
(111)	$[\bar{1}10]$	$\sqrt{2/3} \sigma_{xy} $	S_1		
	$[0\bar{1}1]$	$\sqrt{1/6} \sigma_{xy} + \sigma_{xy} $	S_2		
	$[\bar{1}01]$	$\sqrt{1/6} \sigma_{xx} - \sigma_{xy} $	S_3		
$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$	$[011]$	$\sqrt{1/6} \sigma_{yy} + \sigma_{xy} $	S_4	$\sqrt{1/6} \sigma_{xx} - \sigma_{yy} + 2/\sqrt{3}\sigma_{xy} $	R_3
	$[\bar{1}01]$	$\sqrt{1/6} \sigma_{yy} - \sigma_{xy} $	S_5	$\sqrt{1/6} 1/3\sigma_{xx} + 2\sqrt{3}\sigma_{xy} $	R_6
	$[110]$	$\sqrt{2/3} \sigma_{xy} $	S_1	$\sqrt{1/6} 2/3\sigma_{xx} + 2/\sqrt{3}\sigma_{xy} $	R_4
$(11\bar{1})$	$[011]$			$2\sqrt{2/3} \sigma_{xy} $	R_1
	$[\bar{1}10]$			$\sqrt{1/6} 2/3\sigma_{xx} + 2/\sqrt{3}\sigma_{xy} $	R_4
	$[101]$			$\sqrt{1/6} 2/3\sigma_{xx} - 2/\sqrt{3}\sigma_{xy} $	R_5
$(\bar{1}\bar{1}1)$	$[0\bar{1}1]$	$\sqrt{1/6} \sigma_{yy} - \sigma_{xy} $	S_5	$\sqrt{1/6} \sigma_{xx} - \sigma_{yy} - 2/\sqrt{3}\sigma_{xy} $	R_2
	$[110]$	$\sqrt{2/3} \sigma_{xy} $	S_1	$\sqrt{1/6} 2/3\sigma_{xx} - 2/\sqrt{3}\sigma_{xy} $	R_5
	$[101]$	$\sqrt{1/6} \sigma_{yy} + \sigma_{xy} $	S_4	$\sqrt{1/6} 1/3\sigma_{xx} - \sigma_{yy} $	R_6
$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$	$[\bar{1}10]$	$\sqrt{2/3} \sigma_{xy} $	S_1		
	$[011]$	$\sqrt{1/6} \sigma_{xx} + \sigma_{xy} $	S_2		
	$[101]$	$\sqrt{1/6} \sigma_{xx} - \sigma_{xy} $	S_3		

템과 관계되는 분해전단응력이므로 이들 분해전단 응력에 의해 슬립이 일어나면 두 방향의 슬립선이 웨이퍼 표면에 나타나게 된다. 이에 대한 실험결과를 Fig. 9에 나타내었다.

4.1 슬립 발생의 예측

열응력에 의해 실리콘 웨이퍼에 소성변형 현상인 슬립이 일어날 것인가는 계산된 열응력의 슬립면에서의 슬립방향 성분과 웨이퍼의 항복응력을 비교하

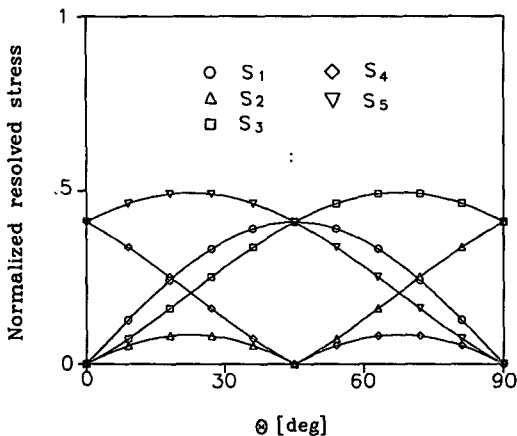


Fig. 6 Distribution of the normalized stresses resolved on the five independent slip systems for the (100) wafer along θ

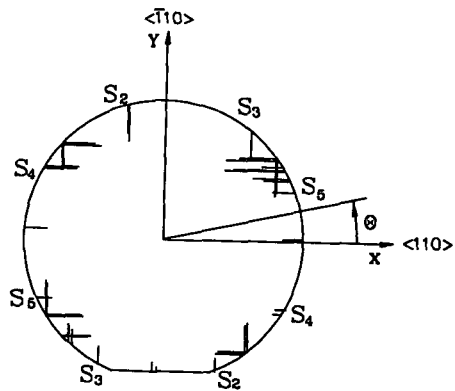


Fig. 7 Observed slip lines on a (100) wafer and associated stresses resolved on the slip systems

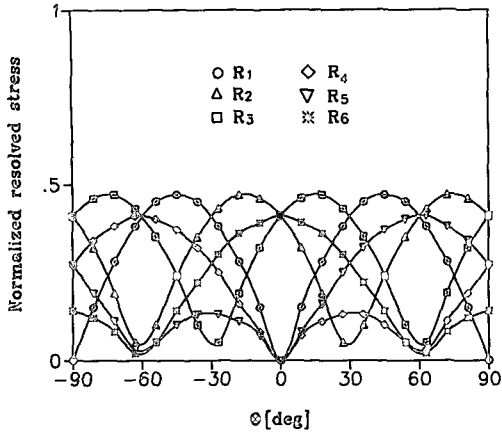


Fig. 8 Distribution of the normalized stresses resolved on the six independent slip systems for the (111) wafer along θ

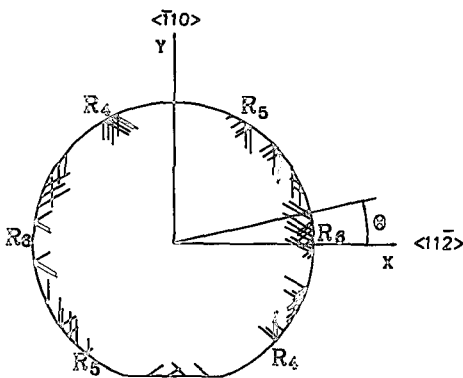


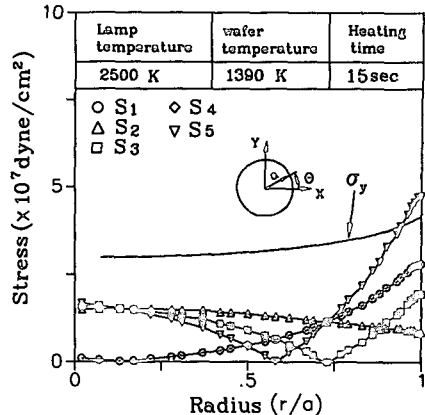
Fig. 9 Observed slip lines on a (111) wafer and associated stresses resolved on the slip systems

면 알 수가 있다. 실리콘 웨이퍼의 항복응력 σ_y 는 웨이퍼에 존재하는 초기 전위 밀도와 온도, 변형률 속도의 함수⁽⁴⁾로 시편의 초기 상태와 가열 조건 등에 의해 달라지며

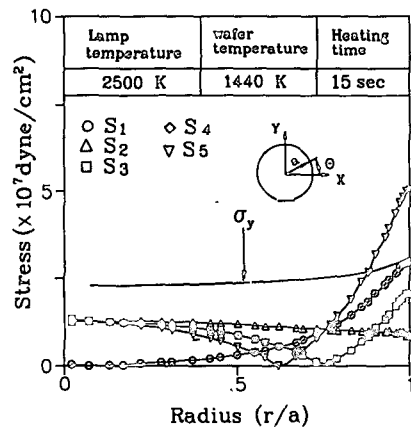
$$\sigma_y = C \dot{\epsilon}^{1/n} \exp(U/nKT), \quad (11)$$

로 쓸 수 있다. 여기서 U 는 미끄러짐에 대한 활성화 에너지, C 와 n 은 재료의 초기 상태 등을 반영하는 물질 상수로 $U=2.3\text{eV}$, $C=4.5 \times 10^6 \text{dyne/cm}^2$, $n=2.3-2.9$ ⁽⁹⁾이며, T 는 웨이퍼의 온도, K 는 boltzman 상수이고, 변형률 속도 $\dot{\epsilon}$ 는 웨이퍼의 변형률 ϵ 를 가열 시간 ΔT 로 나눈 값이다.

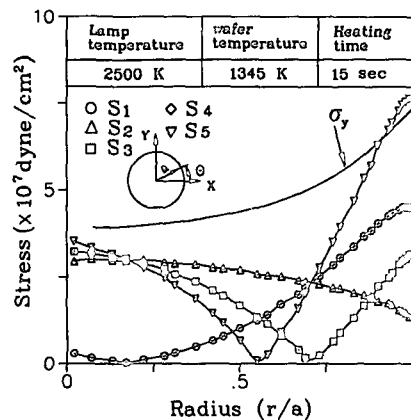
급속 열처리시 웨이퍼에서의 슬립 발생 여부를 예측하기 위해 램프의 온도를 2500K로 일정하게



(a) $t=10\text{sec}$



(b) $t=15\text{sec}$



10(c). $t=16\text{sec}$

Fig. 10 Computed resolved shear stresses for 5 slip systems in (100) wafer ($\theta=22.5^\circ$). For comparison, the corresponding yield stress is drawn in solid line.

놓고 15초 동안 웨이퍼를 가열한 후 냉각시킬 때 시간에 따른 웨이퍼의 온도분포와 이에 의해 (100) 웨이퍼에 걸리는 열응력을 계산하고, 슬립 시스템의 분해전단 응력 S_0 가 최대값을 가지는 $\theta=22.5^\circ$ 에서 웨이퍼의 각 슬립시스템에 걸리는 분해전단 응력과 항복응력을 Fig. 10(a), (b), (c)에서 비교하였다. 여기서 슬립이 일어나는 부분은 분해 전단 응력이 항복응력보다 크게 계산된 부분이다. 이 때 항복응력은 식 (11)에 $C=4.5 \times 10^5 \text{ dyne/cm}^2$, $n=2.5$, 변형률 속도 $\dot{\epsilon}$ 는 가열시간 10초, $r=a$, $\theta=0$ 에서의 변형률을 시간 증분 10초로 나누어 그 값을 일률적으로 적용하였다. 해석 결과 웨이퍼에서의 슬립은 가열 시간이 지나 웨이퍼의 온도가 높을수록 많이 일어나는 것을 알 수 있는데, 이는 웨이퍼의 온도가 높을수록 웨이퍼 가장자리에서 복사에 의한 열손실이 많아져 온도구배가 심해지고, 이에 따라 웨이퍼에 발생하는 열응력이 커지는 반면, 항복응력은 작아지기 때문이다. 가열할 때와 냉각시킬 때의 경우를 비교해 보면 냉각시킬 때 웨이퍼에는 심한 온도구배가 생기면서 가열할 때보다 큰 열응력이 걸리지만 웨이퍼의 온도가 급격히 떨어지면서 항복응력이 커지므로 슬립은 적게 일어난다. 따라서 웨이퍼에 나타나는 슬립선은 대부분 가열할 때 발생한다고 볼 수 있다.

웨이퍼의 온도를 구하는 프로그램에서 일정한 값으로 유지시키는 램프의 온도를 달리하여 웨이퍼의 가열속도 변화에 따른 웨이퍼 반경 방향의 온도분포 변화를 살펴 보았을 때, 웨이퍼의 온도구배는 가열속도에 관계없이 웨이퍼가 갖는 온도값에 의해 결정되는 것을 볼 수 있었으며 이를 Fig. 11에 나타내었다. 여기서 램프온도 2500K, 가열시간 7초일 때와 램프온도 2250K, 가열시간 14초일 때 직경 3-inch인 웨이퍼의 온도분포가 거의 일치하는 것을 볼 수 있다. 웨이퍼에 걸리는 열응력이 가열 속도에 관계없이 웨이퍼의 온도에 따라 거의 일정하게 결정되는 반면, 변형률 속도의 함수인 웨이퍼의 항복응력은 웨이퍼의 가열속도가 커질수록 증가하므로, 웨이퍼의 가열속도를 높일 때 웨이퍼에 생기는 슬립량이 줄어들 것을 예측할 수 있다. 이러한 가열속도 변화에 따른 슬립량의 차이에 대한 해석 결과를 Fig. 12에 나타내었다. 위의 해석결과를 실험결과와 비교하기 위해 웨이퍼 중심부의 온도를 1393K로 올리는데 걸리는 시간을 3초, 15초, 30초로 하고 1393K에서 30초 동안 일정하게 유지시킨

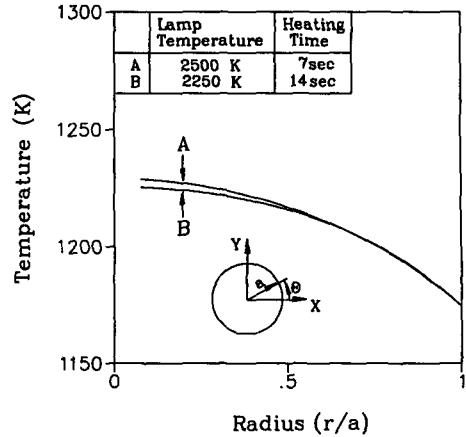


Fig. 11 Comparison of temperature distribution with different lamp temperature and heating time ($\theta=0$)

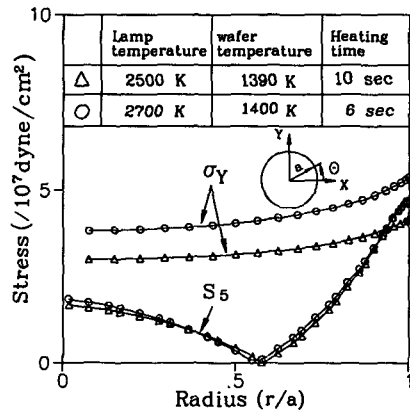


Fig. 12 Comparison of computed maximum resolved shear stresses for two cases with different heating rates (almost identical temperature at the center) in slip system S of (100) wafer ($\theta=22.5^\circ$): For comparison, the corresponding yield stress is drawn

후 냉각시켜 각각의 웨이퍼에 생긴 슬립의 양을 비교하였을 때, 일정온도(1393K)에 도달하는 시간을 짧게하여 웨이퍼의 가열속도를 크게 할 때일수록 웨이퍼에는 슬립이 적게 생기는 것을 확인할 수 있었다.

4.3 슬립의 진전

웨이퍼를 고온에서 가열할 때 웨이퍼에 항복에 의한 슬립이 일어나면, 웨이퍼의 온도를 일정하게 유지하면서 가열을 계속할 때 슬립선의 길이가 시간에 따라 길어지는 현상을 관찰할 수 있는데⁽⁵⁾,

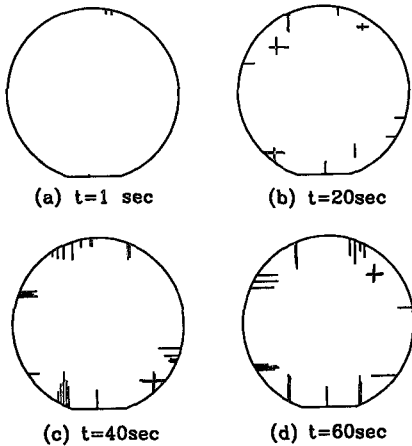


Fig. 13 Growth of slip lines on the 3" (100) wafer kept at $T=1393K$ as holding time t varies

이 현상은 웨이퍼의 슬립 시스템에 작용하는 전단 응력이 실리콘 내부의 전이 이동에 대한 저항보다 클 때 웨이퍼의 슬립에 의해 발생한 이동 전이가 진전하면서 나타나게 된다. 실리콘내의 전위 속도는 전위에 작용하는 응력과 온도의 함수이며, 실험식⁽²⁴⁾으로 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$v = B_0 (\sigma / \sigma_0)^n \exp(-Q/KT), \quad (12)$$

여기서 B_0 는 4.3×10^2 cm/sec, n 은 1.1, Q 는 Peierls potential로 2.17eV, K 는 Boltzman 상수, T 는 절대온도, σ_0 는 10MN/m², σ 는 외부응력(허용범위 1-30MN/m²)을 나타낸다. 가열램프의 온도를 2500K로 일정하게하고 계산한 온도 중 웨이퍼 중심의 온도가 1390K일 때의 온도 분포로부터 열응력을 계산하고, 그 결과에서 구한 최대 분해전단응력 $\sigma=5MN/m^2$ 을 식(12)에 대입하여 전위의 속도를 구하면 전위 속도 v 는 0.29mm/sec이다. 3-inch(100)웨이퍼를 웨이퍼의 중심온도가 1393K로 일정하게 유지되도록하고 유지시간을 1초, 20초, 40초, 60초로 달리했을 때 각각의 웨이퍼에 생긴 슬립선의 분포에 대한 실험 결과를 Fig. 13에 나타내었는데, 여기서 유지시간이 1초일 때는 거의 없던 슬립선이 20초일 때는 대략 8mm, 40초일 때는 12mm, 60초일 때는 14mm정도의 길이를 갖는 것을 볼 수 있다. 이 때 슬립의 진전량이 시간이 경과할수록 줄어드는 것은 웨이퍼의 내부로 갈수록 웨이퍼에 걸리는 열응력 값이 작아지는 것이 가장 큰 요인일 것이다. 시간에 따른 슬립선의 길이 변

화에 대한 실험결과와 계산값을 비교해보면 거의 비슷한 값을 갖는 것을 알 수가 있다.

5. 결론

고온에서 짧은 시간 동안 열처리를 행하는 급속 열처리 공정에서 웨이퍼가 갖는 온도 분포, 온도 구배에 의한 열응력을 수치적인 방법으로 계산하고 열응력에 의해 웨이퍼에 나타나는 슬립 현상에 대하여 고찰하였으며 다음의 결론을 얻었다.

(1) 급속 가열 시스템에서 웨이퍼의 온도 구배는 웨이퍼의 온도에 좌우되며 가열 속도의 영향은 별로 받지 않는다.

(2) 웨이퍼의 가열 속도를 높이면 일정온도에서 웨이퍼에 걸리는 열응력값은 거의 변화가 없는 반면, 변형률 속도의 증가로 인해 웨이퍼의 항복응력이 커지므로 웨이퍼에 발생하는 슬립을 줄일수 있다.

(3) 단결정 실리콘 웨이퍼의 방향성을 고려해서 계산한 응력값과 등방성을 가정해 계산한 응력값과는 거의 차이가 없었다.

참고문헌

- (1) 김충기, 1990, 초미세 전자소자 기술 개발에 관한 연구, 한국 과학 기술원 보고서.
- (2) Widmer, A.E. and Rehwald, W., 1986, "Thermoplastic Deformation of Silicon Wafers," J. Electrochem. Soc., Vol.133, pp. 2403~2409.
- (3) Bentini, G., Correr, L. and Donolato, C., 1984, "Defects Introduced in Silicon Wafers during Rapid Isothermal : Thermoelastic and Thermo-plastic Effects," J. Appl. Phys., Vol.56, pp. 2922 ~2927.
- (4) Siethoff, H. and Hassen, P., 1968, "Lattice Defects in Semiconductors," Edited by Hasiguti, R.R., University of Tokyo, Tokyo.
- (5) Ritz, K.N. and Delfino, M., 1986, "Observation of Slip Dislocations in (100) Silicon Wafers after BF Ion Implantation and Rapid Thermal Annealing," J. Appl. Phys., Vol.60, pp. 800~802.
- (6) Lord, H.A., 1988, "Thermal and Stress Analysis of Semiconductor Wafers in a Rapid Thermal Processing Oven," IEEE Transactions on Semi-

- conductor Manufacturing, Vol.1, pp. 105~114.
- (7) Young, G.L. and McDonald, K.A, 1990, "Effect of Radiation Shield Angle on Temperature and Stress Profiles During Rapid Thermal Annealing," IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing, Vol.3, pp. 176~182.
- (8) Moslehi, M.M., 1989, "Process Uniformity and Slip Dislocation Patterns in Linearly Ramped Temperature Transient Rapid Thermal Processing of Silicon", IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing, Vol.2, pp. 130~140.
- (9) 平澤茂樹, 1989, "Measurement of Thermal Radiative Properties of Silicon Wafers with Oxide Film and Nitride Film of 950°C," 일본기계학회 논문집(B편), 55권 516호, pp. 2404~2410.
- (10) Howell, J.R., 1982, "A Catalog of Radiation Configuration Factors," McGraw-Hill, p. 43.
- (11) Jaluria, Y., 1980, "Natural Convection," Pergamon Press, p. 264.
- (12) Churchill, S.W., 1975, "Correlating Equation for Laminar and Turbulent Free Convection from a Vertical Plate," Int. J. HAM, Vol.18, pp. 1323~1329.
- (13) Wybourne, M.N., 1988, "Properties of Silicon," EMIS Datareview Series No.4, INSPEC, p. 37.
- (14) Wybourne, M.N., 1988, "Properties of Silicon," EMIS Datareview series No.4, INSPEC, p. 44.
- (15) Howell, J.R., 1981, "Thermal Radiation Heat Transfer," second edition, p. 742.
- (16) McMahon, H.O., 1950, "Thermal Radiation from Partially Transparent Reflecting Bodies," J. The Optical Society of America, Vol.40, pp. 375~380.
- (17) Stultz, T.J., "Rapid Thermal Processing : Equipment issues for High Volume Production Environment," Peak System Inc., Report, 1989.
- (18) Sato, T., 1967, "Spectral Emissivity of Silicon," Japanese J. Applied Physics, Vol.6, pp. 339~347
- (19) Anderson, D.A., 1984, "Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer," McGraw-Hill, pp. 117~118.
- (20) Mclellan, A.G., 1980, "The Classical Thermodynamics of Deformable Materials," Cambridge University Press, Cambridge.
- (21) Hirth, J.P., 1968, "Theory of Dislocation," McGraw-Hill, New York.
- (22) Owen, J.R.J., Hinton, E., 1980, "Finite Elements in Plasticity : Theory and Practice, Pineridge Press, Swansea.
- (23) Mokuya, K. and Matsuba, I., 1989, "Predictions of Defect Onset Condition in Heat Cycling Based on a Thermoelastic Wafer Model", IEEE Transactions on Electric Devices, Vol.36, pp. 319~327.
- (24) George, A., 1972, "Velocity of Screw and 60°-Dislocations in Silicon," Phys. Stat. Sol.(b), Vol.53, pp. 483~496.