

論文 96-33A-5-12

반도체 공정 시뮬레이션을 위한 통합 TCAD 개발

(Development of Integrated TCAD for VLSI Process Simulation)

尹相鎬*, 李庚一*, 孔聖元**, 李濟熙*, 元太映*

(Sangho Yoon, Kyungil Lee, Sungwon Gong, Jaehee Lee, and Taeyoung Won)

요 약

본 연구에서는 PC의 Windows™ 환경에서 운용되는 반도체 공정 시뮬레이터를 제작하였다. 개인용 컴퓨터의 계산 속도 및 메모리 활용 수단의 한계가 개선됨에 따라, 방대한 양의 계산을 요구하는 반도체 공정 시뮬레이션이 개인용 컴퓨터에서 가능하게 되었다. 본 연구에서 개발된 반도체 공정 시뮬레이터는 통합 환경 2차원 반도체 공정 시뮬레이터로서, 이온 주입, 확산, 산화, 식각, 증착 등의 반도체 단위 공정 모듈과 입력 파일 편집기, 구문 분석기와 2차원 및 3차원 그래픽 루틴을 포함하고 있다.

Abstract

A semiconductor process simulator operated in Windows™ environment has been developed. Two-dimensional process simulation in personal computer has been enabled due to the improvement of CPU speed and the efficient use of memory. The process simulator in this paper is capable of calculating diffusion, oxidation, ion implantation, etching and deposition in two-dimensional manner. In addition, graphic-user-friendly editor, parser, and multi-dimensional graphical routine is also available in the developed simulator.

I. 서 론

현재 우리 나라의 반도체 산업은 1980년대 중반 64KB DRAM의 생산을 시작으로 매년 괄목할 만한 성장을 거듭하고 있다. 특히, 차세대의 반도체 기술은 최소 선폭 0.1 μ m 급의 가공 기술이 요구되므로, 고도의 반도체 장비 제조 기술 및 CAD 기술이 요구되고 있는 것이다. 반도체 제조 공정의 개발을 위한 실험 결과를

얻기까지는 막대한 연구 시간과 연구비가 소모된다. 따라서, 시장에 대한 시간성(Time-to-Market)을 개선하고 각 공정 및 소자의 민감도(Sensitivity)분석과, 측정할 수 없는 효과에 대한 이해와 분석, 소자의 구조적 형상과 물리적 현상의 시간적 파악 및 분석을 위하여 실제의 실험에 앞서서 컴퓨터를 이용한 반도체 공정 시뮬레이션은 필수적인 것이다. 현재 반도체 제조 및 연구 분야에 사용되고 있는 각종 시뮬레이터들은 워크스테이션 급의 하드웨어를 요구하기 때문에 반도체 생산 라인 및 연구 분야에서 폭넓게 활용되고 있지 못한 실정이다. 그러나, 개인용 컴퓨터의 CPU가 고성능화되고 Windows™ 환경에서 메모리 사용의 한계가 개선됨에 따라, 개인용 컴퓨터에서도 많은 메모리를 필요로 하는 반도체 공정 시뮬레이터의 운용이 가능하게 되었다. 본 연구에서 개발 중인 다차원 반도체 공정 시뮬레이터는 PC의 Windows™ 환경에서 실행되며, 이

* 仁荷大學校 電子材料工學科

(Department of Electronic Materials & Devices Engineering, Inha University)

** 三星電子(株) 半導體部門

(Samsung Electronics Inc., Semiconductor Business)

接受日字: 1995年1月12日, 수정완료일: 1996年4月23日

은 주입, 확산, 산화, 식각, 증착 등의 단위 공정에 대한 모의 실험이 가능하고, 각각의 단위 공정들은 일종의 프로그램 언어인 TCAD(Technology Computer Aided Design) 언어를 사용하여 사용자가 각 단계별 명령어를 시간 순으로 기술하면 구문 분석(Parsing)을 거쳐서 각 단위 공정 모듈들이 적절하게 불러지게 된다. 각각의 모듈들은 마스터 포맷(Master Format)으로부터 필요한 자료를 얻어 계산 후 다시 기록하게 된다. 필요한 결과의 출력은 이 마스터 포맷을 기반으로 2차원 및 3차원 컨투어맵(Contour Map)의 그래픽으로, 혹은 문자로 표현되게 된다.

II. TCAD의 구성

반도체 공정 시뮬레이터는 일반적인 다른 시뮬레이터에 비하여 각 공정마다 많은 변수(Argument)들이 존재하고, 단위 공정들이 시간에 따른 흐름을 가지고 반복이 되므로, 단위 공정의 명령어들과 그에 따른 변수들을 기술하는 일종의 언어 형식을 가질 수밖에 없다. 따라서 각 단위 공정의 모듈들을 만드는 것과, 모듈들을 연결하고 관리하는 관리자 및 소스 파일을 분석해서 데이터를 관리하는 구문 분석기와 구문 분석 트리(Tree)가 필요하게 된다. 또한, 본 연구에서 제작한 TCAD는 통합 환경으로서, 각 단위 공정들의 계산 뿐만 아니라 한 프로그램 안에서 명령 파일 작성과 오류 수정이 모두 가능하도록 제작되었다(그림 1 참조). 각 과정 중의 모든 오류는 일괄적으로 오류표(Error Table)에 기록하게 되며, 결과의 출력은 내부적 마스터 포맷을 PIF⁽¹⁾로 변형하여, 그 프로파일을 출력하거나, 2차원과 3차원의 그래픽으로 출력하게 된다.

WindowsTM 환경에서의 TCAD 통합 환경은 명령 파일 작성 및 오류 수정 기능을 갖추고 시뮬레이션을 수행한다. 그림 2에서는 명령 파일 편집 창(Window)에서 작성한 파일을 구문 분석하여 발견된 명령의 오류를 아래쪽의 창에서 보여주고 있는데, 기존의 SUPREM-IV와 같은 프로그램에서는 입력 파일에 문법적인 오류가 있을 경우, 시뮬레이션을 수행하는 도중에 오류로 인한 프로그램의 실행 중지가 이루어졌는데, 이러한 점을 보완하기 위하여, 본 연구에서 제작한 TCAD에서는 입력 파일의 문법 오류를 미리 검사하도록 제작되었다. 그림 3은 오류를 수정한 후 LINE, ETCH, DEPOSIT, PLOT 등의 명령에 의하여 시물

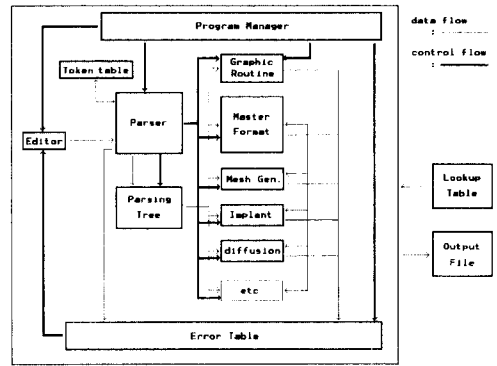


그림 1. 개발되어진 TCAD 시스템의 구성도
Fig. 1. Schematic diagram showing the functional block of the developed system.

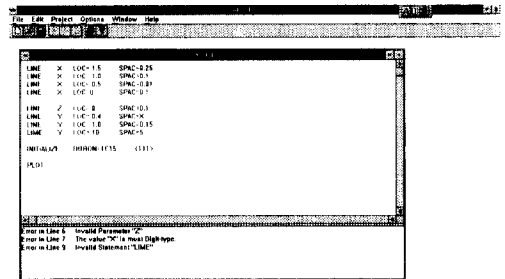


그림 2. 통합 TCAD 환경 내에서 명령 파일의 입력과 구문 분석 및 오류 수정 결과를 보여주는 그림
Fig. 2. Editing, parsing, and debugging example in the integrated TCAD environment.

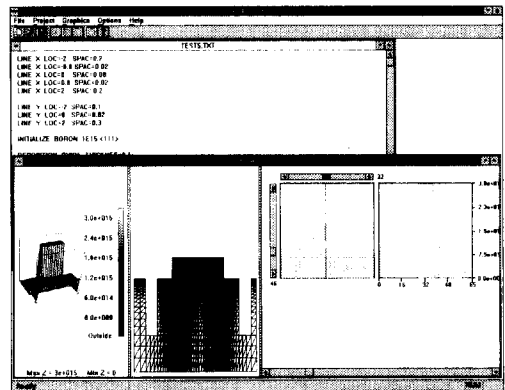


그림 3. 명령 파일의 편집으로 시뮬레이션을 위한 초기 구조를 형성한 결과
Fig. 3. The initial structure exhibiting meshes defined for process simulation.

레이션을 위한 구조를 형성하고, 그리드를 생성하여 새로운 창에 2차원 및 3차원 분포 및 컨투어맵을 함께 보여주고 있다.

Ⅲ. 이온 주입

이온 주입의 해석적 방법은 이온 주입 후의 불순물 분포가 이온 주입량(Dose)과 주입 에너지에 따라서 확률 분포 함수의 모양을 가지게 되는 것에 착안하여 몇 가지 기본적인 분포 함수를 실험치에 적용(Fitting)을 하여서 시뮬레이션시 적절히 사용하게 된다. 본 연구에서 사용한 분포 함수로는 비정질 반도체에서 비교적 잘 맞는 가우시안 분포와, 실제 공정 결과를 바탕으로 한 피어슨 분포 및 단결정 반도체에서 관찰되는 채널링(Channeling)현상까지 표현 가능한 듀얼피어슨^[3] 함수를 사용하게 된다.

1. 가우시안(Gaussian) 방법

가우시안 분포 함수는 식(1)과 같다. 가우시안 분포 함수에 3차 모멘트를 고려하면 식(2)와 같이 표현되고, 이 가우시안 함수에 오차함수(erfc)를 이용하여, 측면 확산^[2]을 고려하면 식(3)이 된다.

$$C(x) = \left(\frac{D}{\sigma\sqrt{2\pi}} \right) e^{-(x-R_p)^2/2\sigma^2} \quad (1)$$

$$C(x) = \left(\frac{D}{\sigma\sqrt{2\pi}} \right) e^{-(x-R_p)^2/2\sigma^2} \left[1 - \frac{\alpha_3}{2} \left(\frac{x}{\sigma} - \frac{x^3}{3\sigma^3} \right) \right] \quad (2)$$

$$C(x, y) = \left(\frac{D}{2\pi\sigma^2} \right) e^{-(x-R_p)^2/2\sigma^2} \left[\left(\frac{1}{\sqrt{\pi}} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{(x-a)}{\sigma_y\sqrt{\pi}} \right) \right] \quad (3)$$

여기서 $\alpha_3^2 = \beta_1 = \frac{\Pi_3^2}{\Pi_2^2}$ 이며 이것을 정규왜곡률(Normalized skewness factor)라고 한다.

2. 피어슨(Pearson) 방법

본 연구에서 사용한 피어슨 분포 함수는 피어슨IV 분포 함수와 듀얼 피어슨 분포 함수로서 다음과 같이 구해진다. 먼저 피어슨 분포 함수는 식(4)으로 표현되는 피어슨 미분방정식으로부터 얻어진 식(5)을 이용하여 계산된다.

$$\frac{(x-a)}{b_0 + b_1x + b_2x^2} f(x) - f'(x) = 0 \quad (4)$$

$$f(x) = K \cdot |b_2(x-R_p)^2 + b_1(x-R_p) + b_0|^{1/2\alpha} \cdot \exp \left[- \left(\frac{b_1 + 2a}{\sqrt{4b_2b_0 - b_1^2}} \right) \cdot \arctan \left(\frac{2b_2(x-R_p) + b_1}{\sqrt{4b_2b_0 - b_1^2}} \right) \right] \quad (5)$$

$$a = - \frac{\Delta R_p \gamma (\beta + 3)}{A} \quad (6)$$

$$b_0 = - \frac{\Delta R_p^2 (4\beta - 3\gamma^2)}{A} \quad (7)$$

$$b_2 = - \frac{(2\beta - 3\gamma^2 - 6)}{A} \quad (8)$$

$$A = 10\beta - 12\gamma - 8 \quad (9)$$

여기서, $b_1 = a$ 이며, R_p 는 투사 거리(Projected Range), ΔR_p 는 표준편차, γ 는 Skewness, β 는 Kurtosis이다. 이와 같이 표현되는 피어슨 분포 함수에서 다음의 식(10)과 같은 조건을 만족할 때 피어슨IV 분포 함수라고 하고 여러 가지 피어슨 분포 함수 중에서 실제 결과와 가장 잘 맞는 분포 함수로 알려져 있는데, 실험을 통하여 얻어진 각 이온과 에너지에 따른 R_p , ΔR_p , γ , β 데이터들을 사용하여 계산하게 된다.

$$\text{Pearson IV} : 0 < \gamma^2 < 32, \quad \beta > \frac{39\gamma^2 + 48 + 6(\gamma^2 + 4)^{3/2}}{32 - \gamma^2} \quad (10)$$

그러나, 단결정 반도체의 경우에는 채널링 현상으로 인하여 그 모양이 현저하게 달라지고 단일 피어슨IV로는 표현하기가 어렵다. 이를 극복하기 위해서 듀얼피어슨 함수를 사용하는데, 이것은 두 개의 피어슨IV 함수를 Dose량에 따른 비율로 선형 결합을 한 다음과 같은 형태의 함수가 된다.

$$C(x) = D_1 f_1(x) + D_2 f_2(x) \quad (11)$$

$$C(x) = D [R f_1(x) + (1-R) f_2(x)] \quad (12)$$

여기서, $R = D_1/D$ 이며 $f_1(x)$ 과 $f_2(x)$ 는 각각 피어슨IV 함수이고 모두 정규화 되어 있다. 그리고, 듀얼피어슨 분포 함수에서 $f_1(x)$ 는 라만 산란(Raman scattering) 영역을 나타내는 함수이고, $f_2(x)$ 는 채널링 효과에 의한 영역을 나타내는 함수에 해당한다.

3. 몬테카를로 방법

몬테카를로 방법은 주입 이온에 대한 목표 기관 내에서의 산란 및 에너지 손실 과정을 3차원적으로 직접 취급한 것으로, 해석적 모델에 비하여 계산 시간은 방대하지만 형상 및 해석 차원에 관하여 원리적으로 제약은 없다. 몬테카를로 방법은 난수를 사용한 통계적 시뮬레이션이라는 점에 입각하여 도중의 계산 결과를 재이용하여 결과적으로 보다 많은 입자를 사용한 시뮬레이션을 실행한 것에 상당하는 방법이 제안되고 있다.

이온이 충돌로 산란을 하기 전에 움직이는 거리 L 을 식(13)과 같이 정의한다. 이온이 물질 내에 입사되면 식(14)와 같은 값을 가지는 충돌 매개변수 b (입자가 가장 접근한 거리)를 가지고 첫 번째 목표 원자를 향해 나아간다. 식(14)에 대하여 b 와 $b + \delta b$ 사이의 목표물을 찾을 수 있는 확률은 식(15)와 같이 주어진다. 만일 R_{rand} 이 0과 1사이에 일정하게 분포해 있는 난수라면 확률 b 는 식(16)과 같이 주어진다.

$$L = \frac{1}{N_{den}^{1/3}} \quad (13)$$

$$b < \frac{1}{\sqrt{\pi N_{den}^{2/3}}} \quad (14)$$

$$w(b) \delta(b) = 2\pi N_{den}^{2/3} b \delta b \quad (15)$$

$$b = \sqrt{\frac{R_{rand}}{\pi N_{den}^{2/3}}} \quad (16)$$

위에서 주어진 정의를 바탕으로, 이온 핵과 충돌함으로써 잃은 에너지의 계산 알고리즘은 다음과 같다.

- ① 0과 1사이의 난수를 선택한다.
- ② 충돌에 대한 정규화된 충돌 매개 변수는 식(17)로부터 구해진다.

$$b_n = \frac{1}{a_u} \sqrt{\frac{R_{rand}}{\pi N_{den}^{2/3}}} \quad (17)$$

- ③ 이온 에너지는 다음과 같이 정규화된다.

$$E = a_u \frac{E_o}{\left[1 + \frac{M_1}{M_2} \right] Z_1 Z_2 k} \quad (18)$$

- ④ 핵산란으로 인한 에너지 손실은 다음과 같고, 아래 식(19)의 $\cos^2(bI)$ 의 값은 저장되어 있는 표로부터 구한다. 여기서, $(\Delta \epsilon_n / \epsilon_n) \ll 1$ 에 대하여, $\theta = 0$ 이 된다.

$$\Delta E_n = E_o \frac{4M_1 M_2}{M_1 + M_2} \cos^2(bI) \quad (19)$$

$$\theta = \cos^{-1} \left[\frac{1 - \frac{1}{2} \left(1 + \frac{M_2}{M_1} \right) \frac{\Delta E_n}{E_o}}{\sqrt{\frac{1 - \Delta E_n}{E_o}}} \right] \quad (20)$$

5. 이온주입 시뮬레이션 결과

본 연구에서 제작한 이온 주입기에서의 시뮬레이션 결과를 다음의 그림에서 도시하였다. 그림 4는 Windows™ 환경에서 이온 주입기의 실행 결과로서 초기에 p형 $1 \times 10^{10} \text{cm}^{-3}$ 으로 도핑된 <111> 방향의 실리콘 기판에 50keV의 에너지를 가진 Boron을

$1 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ 의 양으로 이온 주입한 결과이다. 이 그림의 왼쪽 창에서는 이온 주입 결과를 3차원적 분포를 통하여 주입된 이온의 분포를 쉽게 알 수 있다. 또한 그림의 오른쪽 창에서는 2차원 단면에서의 이온 주입 결과에 대한 분포를 나타내고, 2차원 분포의 그림에서 X축과 Y축 방향으로 사용자가 원하는 위치를 버튼을 사용하여 지정하면, 그 지점에서의 1차원 분포를 2차원 단면을 나타내는 그림의 아래에서 보여주는데, 주입된 이온의 분포에서 최대값이 $1.0 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ 임을 알 수 있다. 2차원 분포의 그림에서 세로선으로 표시된 부분은 Y축 방향의 단면에 대하여 이온들의 1차원적 분포를 나타낼 지점이고, 가로선은 X축 방향으로의 1차원적 분포를 나타낼 부분이다.

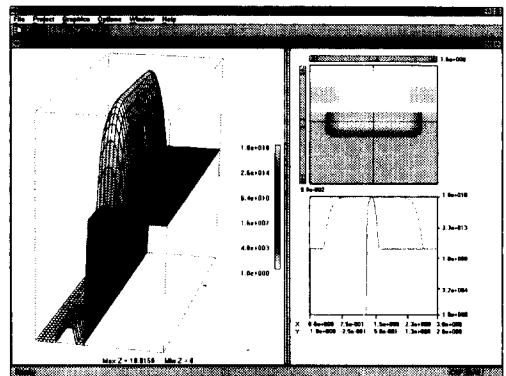


그림 4. Windows™ 환경에서 이온 주입기의 실행 결과. p형 $1 \times 10^{10} \text{cm}^{-3}$ 으로 도핑된 <111>방향 실리콘 기판에 50keV의 에너지를 가진 Boron을 $1 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ 의 양으로 이온 주입한 결과

Fig. 4. Result of Ion Implantation in the developed simulator.

그림 5는 본 연구에서 개발한 DOS 환경의 몬테카를로 이온 주입 시뮬레이터에서의 시뮬레이션 결과로서, $0.02 \mu\text{m}$ 의 산화막이 있는 실리콘에 대하여 6개의 지점에서 Boron을 30keV의 에너지로 10^4 개 이온 주입한 시뮬레이션 결과를 보여주고 있다. 몬테카를로 이온 주입 방법에서는 주로 한 점에 대하여 지정된 개수만큼의 이온을 주입하는 시뮬레이션 과정을 수행하는데, 2차원적인 분포를 정확하게 나타내기 위하여 한 점에 대한 이온 주입 시뮬레이션 결과 이용하여 주입된 이온들의 분포에 대한 측면 방향 분포의 표준편차만큼 점을 이동시키면서 연속적으로 몬테카를로 이온 주입 시뮬레이션을 수행하였다. 그림 6에 본 연구 결과의 정

확도를 비교하기 위하여 IBM사의 몬테카를로 이온 주입 시뮬레이터를 이용한 계산 결과를 도시하고 있다. IBM의 계산 결과는 하나의 점에 대하여 이온 주입한 결과만을 볼 수 있지만, 주입된 이온의 깊이는 본 연구에서 제작한 몬테카를로 시뮬레이션 결과와 잘 일치함을 볼 수 있다. DOS 환경에서 제작된 몬테카를로 이온 주입 시뮬레이터를 Windows™ 환경 통합 환경 시뮬레이터의 한 모듈로 결합하여, 그래픽 환경에서 보다 빠르고 정확한 시뮬레이션 결과를 얻을 수 있을 것이다.

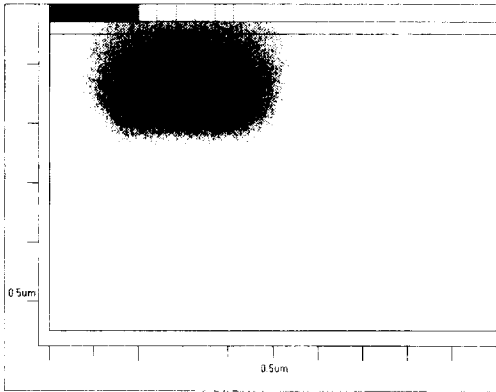


그림 5. 몬테카를로 이온 주입 시뮬레이션 결과
Fig. 5. Monte-Carlo ion implantation.

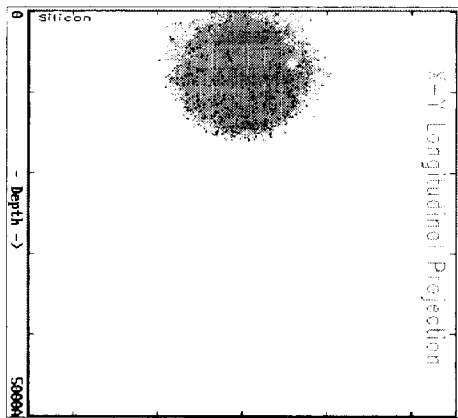


그림 6. IBM사의 몬테카를로 이온 주입 시뮬레이터를 이용한 시뮬레이션 결과
Fig. 6. Monte-Carlo ion implantation developed in IBM.

IV. 확산

1차원에서는 확산 계수에 전계효과, 산화증속확산(OED), 농도에 의한 확산 효과 등을 실험적으로 근사시키는 모델로 만족할 만한 결과를 얻을 수 있다. 그러

나, 2차원적 관점에서 볼 때 불순물(Impurity)의 확산이 점결점(Interstitial, Vacancy)과의 상호 작용에 의한 메카니즘이므로 정확한 모델을 위하여는 불순물과 점결점의 연속 방정식을 동시에 풀어야 한다. 즉, 풀어야 할 확산 방정식은 다음과 같다.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j} + R \tag{26}$$

$$C = \sum_{K=1}^N C_K, \quad J = -\sum_{K=1}^N D_K \vec{\nabla} C_K \pm \frac{qD}{kT} \vec{E}C \tag{27}$$

$$R = R(C(\vec{r}, t), C_I(\vec{r}, t), C_V(\vec{r}, t)) \tag{28}$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_i \frac{\partial C_i}{\partial x} - Z_i D_i N_i \frac{1}{n} \frac{\partial n}{\partial x} \right]$$

$$D_i = D_o + D_p \left(\frac{n_i}{n} \right) + D_m \left(\frac{n}{n_i} \right) + D_{mm} \left(\frac{n}{n_i} \right)^2 \tag{29}$$

식(26)에서 \vec{j} 와 R 은 각각 불순물과 점결점의 플럭스 사이의 상호작용 항들이다. 표준 모델¹⁶⁾로 잘 알려진 식(29)는 불순물에 대한 표준 연속방정식으로서 이것은 따로 분리하여 확산 계수를 통하여 결합시켰다. 식(29)에서 D_i 는 각 불순물의 확산계수이고 Z_i 는 역셉터($Z_i=+1$)와 도너($Z_i=-1$)에 따른 상수이다. 점결점과 불순물의 상호 작용에 의한 연속 방정식과 경계 조건은 참고문헌¹⁸⁾에서 정의한 식을 사용하였다. 또한, 근사적 방법으로 점결점의 확산 계수의 크기가 불순물보다 크므로 정상 상태의 해^{19,10,11,12)}를 고려할 수도 있다. 따라서 수치 해석적 계산의 어려움과 빠른 시뮬레이션 결과를 고려한다면 적절한 공정 범위 내에서 정상 상태의 해를 이용할 수도 있다.

수치해석적으로 확산방정식을 풀기 위하여 주어진 비선형 연립 미분 방정식을 다음과 같은 과정으로 산화 증속 확산으로 변형하였다.

$$\frac{dC}{dt} = f \tag{30}$$

$$C_{(i,b)}^{n+1} = C_{(i,b)}^n + \Delta t \cdot f^{n+1} \tag{31}$$

시간 적분은 역오일러 공식을 사용하였고, 공간 적분은 위치에 따른 연산자를 양자화 시키기 위해 유한차분법을 이용하였다. 먼저 식(31)에서 얻은 식을 풀기 위하여 Newton-Raphson 방법을 적용하면, 아래와 같이 된다.

$$C_{i,j}^{n+1,k+1} = C_{i,j}^{n+1,k} - \frac{F}{F'} \quad , \quad F' \rightarrow \text{Jacobian of } F \tag{32}$$

$$F = C_{(i,b)}^{n+1} - C_{(i,b)}^n - \Delta t \cdot f^{n+1} \tag{33}$$

$$J \cdot \delta C = -F \tag{34}$$

$$C_{new} = C_{old} + \delta C \tag{35}$$

여기서 k는 Newton Iteration이다.

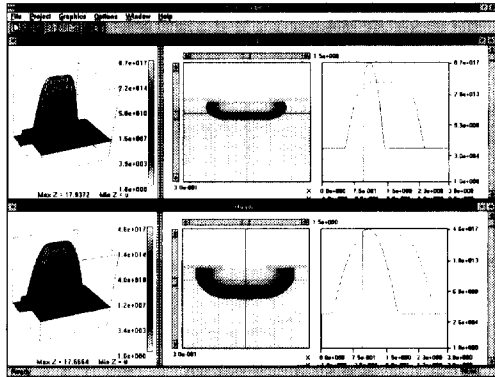


그림 7. 2차원 불순물 확산 시뮬레이션 결과
Fig. 7. Impurity Diffusion in 2-Dimension.

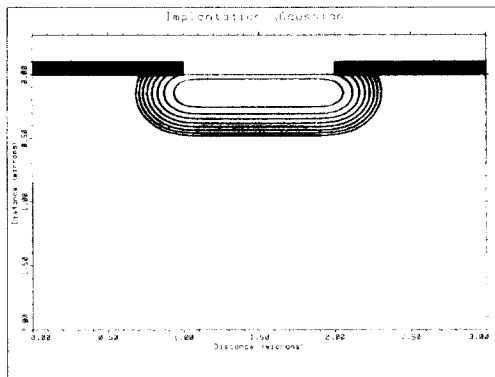


그림 8. SUPREM-IV의 Implantation 결과
Fig. 8. Implantation in SUPREM-IV at the same condition.

그림 7은 위의 확산 모델 중 표준 1차원 확산 모델을 사용하여 얻은 불순물의 확산 결과를 나타낸다. 본 연구에서 제작한 시뮬레이터의 계산 결과와 비교를 위하여 그림 8에 SUPREM-IV의 결과도 함께 나타내었다. 그림 7은 본 연구에서 개발한 통합 환경 TCAD에서 해석적인 모델을 사용하여 초기에 p 형 $1 \times 10^{10} \text{cm}^{-3}$ 으로 도핑된 $\langle 111 \rangle$ 방향의 실리콘 기판에 40keV의 에너지로 Boron을 $1 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ 이온 주입한 시뮬레이션 결과와 이를 이용하여 1000°C에서 30분간 확산시킨 결과를 함께 보여주고 있다. 본 연구에서 개발된 시뮬레이터의 계산 결과를 SUPREM-IV에서의 이온 주입 및 확산 결과와 비교하여 그림 8 및 그림 9에 도시하

였다. 그림 7에서, 그림의 오른쪽에 나타난 불순물의 1차원 분포도와 그림 10에 도시한 SUPREM-IV에서의 1차원 결과를 비교해 보면 불순물 분포의 최대값과 접합 깊이가 일치함을 알 수 있다.

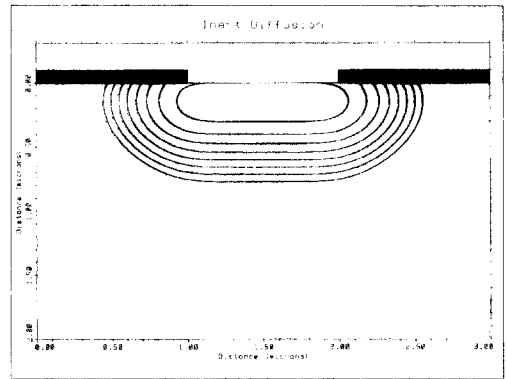


그림 9. SUPREM-IV의 확산 결과
Fig. 9. Diffusion in SUPREM-IV at the same condition.

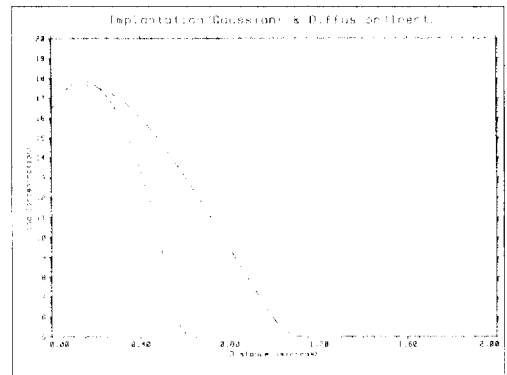


그림 10. SUPREM-IV에서의 1차원 분포
Fig. 10. 1-D distribution in SUPREM.

V. 산 화

산화 공정을 정확하게 시뮬레이션 하기 위하여는 압력(Stress)과 점성(Viscosity)을 고려한 복잡한 미분 방정식들을 동시에 풀어야 하는데, 여기서는 이러한 과정을 거치지 않고 해석적으로 LOCOS의 형태를 얻을 수 있는 ERFC 모델^[13]을 사용한다. 이 모델은 그림 11에서 나타낸 바와 같이 LOCOS의 모양을 두 가지로 구분한다. 모양-1은 패드 산화막의 두께에 비하여 질화막의 두께가 비교적 두껍지 않을 때 압력에 의한 영향이 적은 LOCOS 형태이고, 모양-2는 질화막의 두

계가 산화막의 두께에 비하여 많이 두꺼울 경우 질화막의 압력에 의한 LOCOS 형태의 현저한 변화가 발생한 모양을 나타낸다. 모양-1과 모양-2의 분류는 $2e_n - 5e_{ox} = 0.072$ [μm]의 값을 기준으로 한다. 먼저 모양-1을 나타내기 위해서는 보완적 오차함수 (Complementary Error Function)를 이용한 다음과 같은 해석적인 두 개의 함수가 필요하다.

$$Z_1(y) = a_1 \operatorname{erfc}(b_1 y + c_1) + d_1 \quad (36)$$

$$Z_2(y) = a_2 \operatorname{erfc}(b_2 y + c_2) + d_2 \quad (37)$$

Z_1 은 산화막/실리콘 계면을 나타내는 함수이고, Z_2 는 산화막/분위기, 산화막/질화막의 계면을 나타내는 함수이다. 모양-2에서는 강한 질화막의 압력 때문에 질화막 가장자리의 아래 부분에서 산화막이 현저한 모양의 변화를 일으킨다. 이 때 산화막/실리콘 계면이 질화막 가장자리 보다 길이 δ 만큼 이동한다. 따라서, 모양-2를 나타내는 데에는 각 계면에 대해 두 개씩의 다른 함수가 필요하게 된다.

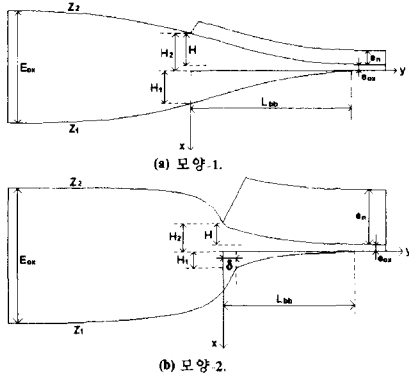


그림 11. (a)모양-1. (b)모양-2. 의 형태
Fig. 11. (a)shape-1. (b)shape-2.

$$Z_1(y) = a_1' \operatorname{erfc}(b_1'(y - \delta)), \quad \text{for } y > \delta \quad (38)$$

$$Z_1(y) = e_1' \frac{d_1' - y}{d_1' - y + q}, \quad \text{for } y \leq \delta \quad (39)$$

$$Z_2(y) = a_2' \operatorname{erfc}(b_2' y) + c_2', \quad \text{for } y > 0 \quad (40)$$

$$Z_2(y) = e_2' \frac{d_2' - y}{d_2' - y + q}, \quad \text{for } y \leq 0 \quad (41)$$

모양-1과 모양-2를 나타내는 함수들에 사용된 계수 $a_1, b_1, c_1, d_1, a_2, b_2, c_2, d_2, a_1', b_1', d_1', e_1', a_2', b_2', c_2', d_2', e_2'$ 는 초기 조건인 e_{ox} (초기 산화막 두께), e_n (초기 질화막 두께)와 산화막의 모양을 나타내는

세 개의 변수들의 함수인데, 세 개의 변수들이란 Deal과 Grove 모델^[14,15]에서 구한 산화막의 두께 E_{ox} , 질화막 아래로 산화막이 침투한 길이 L_{nb} 및 산화 공정 동안 질화막이 들러 올라간 높이 H 를 말하며, 기타 다른 변수들은 참고문헌^[13]에서 정의한 바를 인용하고 있다.

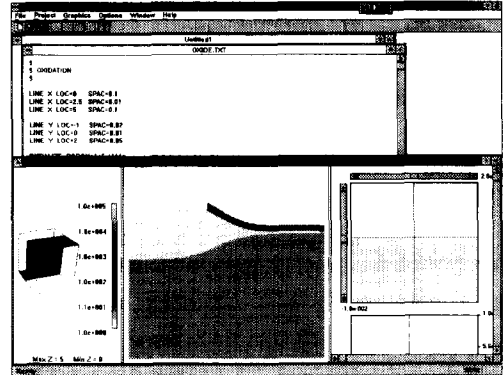


그림 12. 본 연구에서 제작한 산화 시뮬레이터에서의 시뮬레이션 결과
Fig. 12. Result of LOCOS structure in developed oxidation simulator.

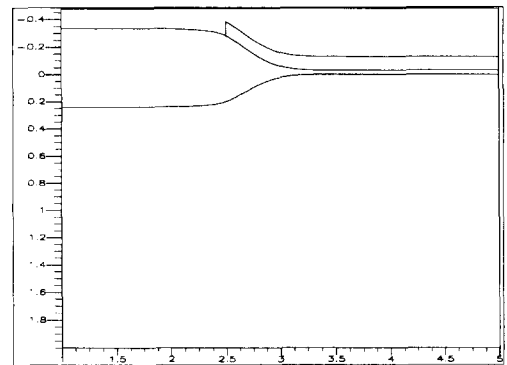


그림 13. SUPREM-IV에서의 시뮬레이션 결과
Fig. 13. Result of oxidation in SUPREM-IV.

본 연구에서 제작한 산화 시뮬레이터는 WindowsTM 환경에서 실행되며, 통합 환경의 입력 파일 작성기에서 산화 공정은 "OXIDATION" 명령에 의하여 실행된다. 산화를 위한 조건의 설정은 초기에 실리콘 기판의 결정 방향을 설정하고, "OXIDATION" 명령문에서 산화의 시간, 온도 및 건식 또는 습식 산화를 지정한다. 그림 12에 도시한 것은 패드 산화막이 $0.03\mu\text{m}$ 이고, 상층 질화막 마스크가 $0.1\mu\text{m}$ 로 증착되어 있는 구조를 산화 시뮬레이션 한 결과로서, 산화 조건

은 1000°C에서 습식 산화 방법으로 200분 동안 실행한 결과이다. 산화막의 성장 두께는 약 0.5 μm 로서, 제13도에 도시한 SUPREM-IV에서의 시뮬레이션 결과 0.58 μm 와는 약간의 차이가 발생하였다. 그러나, 새부리 모양의 질화막 하단으로의 침투 길이는 비교적 잘 일치함을 보여준다.

VI. 결 론

본 연구에서는 PC의 WindowsTM 환경에서 동작하는 2차원 반도체 공정 시뮬레이터를 개발하였다. 종래에는 메모리 사용의 제한으로 인하여 시뮬레이터 운용이 워크스테이션급 이상으로 제한되어 왔으나, 32비트 WindowsTM 환경이 개발됨에 따라서 기존의 고성능 PC 뿐만 아니라, 윈도우즈 NT 기반의 어떤 환경에서도 사용될 수 있는 프로그램을 개발하였다. 제작된 각 단위 공정 시뮬레이터의 시뮬레이션 결과는 SUPREM-IV의 결과와 근사하게 일치하였으며, 각 단위 공정 시뮬레이터 모듈에 고급 모델들을 추가하여 통합 환경에서 운용한다면, 보다 정확한 시뮬레이션 결과를 얻을 수 있을 것이다. 특히 DOS 환경에서 제작된 몬테카를로 이온 주입 시뮬레이터의 결과는 IBM사에서 제작한 몬테카를로 이온 주입 시뮬레이터보다 더 나은 2차원 분포를 구할 수 있었으며, 이를 개별 소자의 개발에 직접 사용하는데 무리가 없을 것으로 예상된다. 앞으로 이온 주입 시뮬레이터는 Si의 결정 방향에 대한 영향을 고려한 채널링 현상 및 경사 이온 주입을 보다 정확하게 모델링하여 시뮬레이션 결과를 보정할 것이다. 그리고, WindowsTM 환경 공정 시뮬레이터의 모듈로 결합하여 그래픽 환경에서 2차원 및 3차원 몬테카를로 이온 주입 시뮬레이터를 제작할 예정이다. 확산 및 산화 모듈은 SUPREM-IV의 결과와 약간의 오차를 보이고 있지만 본 논문에서는 각 공정 모듈을 WindowsTM 환경의 통합 시뮬레이터를 제작한 결과를 보이는 데 중점을 두었다. 2차원 산화 모듈은 OED효과를 보다 정확하게 시뮬레이션하기 위하여 오차를 보정하고 있으며, 확산 및 산화 모듈은 현재 개발 중인 유한요소법을 사용한 3차원 산화 시뮬레이터가 제작 완료되면 WindowsTM 환경의 다차원 반도체 공정 시뮬레이터로 통합되어 보다 정확한 시뮬레이션 결과를 PC에서 얻을 수 있을 것으로 기대된다.

본 연구에서 개발한 반도체 공정 시뮬레이터는 PC

의 WindowsTM 환경에서 실행되며, 486급 이상의 IBM PC에서는 무난히 사용할 수 있도록 제작되었으며, PC에서도 반도체 공정 시뮬레이터의 제작이 가능함을 보였다. 계속 가속화되고 있는 PC의 발전에 비추어 볼 때, PC에서도 많은 메모리 양과 빠른 CPU 속도를 요구하는 3차원 반도체 공정 시뮬레이터의 제작이 가능할 것이라 생각되며, 반도체 공정 시뮬레이터를 PC 환경에서 제작함으로써 반도체 제조 및 연구 분야에서 보다 광범위하게 시뮬레이터를 사용할 수 있을 것으로 생각된다.

※ 본 연구는 한국과학재단 94-08-00-01-2, 시스템공학연구소 D2043 및 산학 협동 재단 연구 과제에 의하여 지원되었다.

참 고 문 헌

- [1] S.G. Duvall, "An Interchange Format for Process and Device Simulation", *IEEE Trans. CAD.*, Vol.7, No.7, pp. 741-754, July, 1988.
- [2] S. Furukawa et. al., "Theoretical Considerations on Lateral Spread of Implantated Ions", *Jap. J. Appl. Phys.* 11, pp.134-142, 1972.
- [3] A.F. Tasch, "An Improved Approach to Accurately Model Shallow Band BF₂ Implants in Silicon", *J. Electrochem. Soc.*, 136, No.3, 1989.
- [4] G.A.J. Amaratunga, K.F. Gibbons, T.W. Sigmon, "The Modeling of Ion Implantation in a Three-Layer Structure Using the Method of Dose Matching", *IEEE Trans. Electron Devices*, Vol. ED-32, No.9, p. 1899, Sep. 1985.
- [5] G. Hobler, S. Selberherr, "Monte Carlo Simulation into Two- and Three-Dimensional Structures", *IEEE Trans. CAD.*, vol. 8, no. 5, pp. 450-459, May 1989.
- [6] M.R. Kump, R.W. Dutton, "The Efficient Simulation of Coupled Point Defect and Impurity Diffusion", *IEEE Trans. CAD.*, vol. 7, no. 2, pp. 191-204, Feb. 1988.
- [7] E. Rorris, R.R. O'Brien, F.F. Morehead, R.F. Lever, J.P. Peng, G.R. Srinivasan, "A New

Approach to the Simulation of the Coupled Point Defects and Impurity Diffusion", *IEEE Trans. CAD.*, vol. 9, no. 10, pp. 1131-1121, Oct. 1990.

[8] W.B. Richardson, G.F. Carey, B.J. Mulvaney, "Modeling Phosphorous Diffusion in Three Dimensions", *IEEE Trans. CAD.*, vol. 11, no. 4, pp. 487-496, Apr. 1992.

[9] H.R. Yeager, R.W. Dutton, " An Approach to Solving Multiparticle Diffusion Exhibiting Nonlinear Stiff Coupling", *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ED-32, no. 10, pp. 1964-1975, Oct. 1985.

[10] D.A. Antoniadis, I. Moskowitz, "Diffusion of substitutional impurities in silicon at short oxidation times : An insight into point defect kinetics", *J. Appl. Phys.*, vol. 53, no. 10, pp. 6788-6796, Oct. 1982.

[11] S.M. Hu, "Interstitial and vacancy concentration in the presence of interstitial injection", *J. Appl. Phys.*, vol. 53, no. 10, pp. 1069-1075, Feb. 1985.

[12] F.F. Morehead, R. F. Lever, "The steady-state model for coupled defect-impurity diffusion in silicon", *J. Appl. Phys.*, vol. 66, no. 11, pp. 5349-5352, Dec. 1989.

[13] N. Guillemot, G. Pananakakis, P. Chenevier, "A new analytical model of the "Bird's Beak"", *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ED-34, no. 5, pp. 1033-1038, May 1987.

[14] B.E. Deal, A.S. Grove, "General relationship for the thermal oxidation in silicon", *J. Appl. Phys.*, vol. 36, no. 12, 1965.

[15] 원태영, *VLSI 工程 SIMULATION*, 반도체출판사, pp. 111- 134, 1994

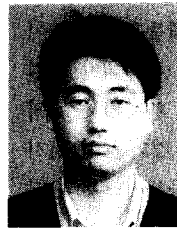
저 자 소 개



尹相鎬(正會員)

1969년 11월 20일생. 1995년 인하대학교 전자재료공학과(공학사). 1995년~현재 인하대학교 전자재료공학과 석사과정. 주관심분야는 반도체 공정 물리,

시뮬레이션 등임



李庚一(正會員)

1971년 7월 14일생. 1995년 인하대학교 전자재료공학과(공학사). 1995년~현재 인하대학교 전자재료공학과 석사과정. 주관심분야는 반도체 공정 시뮬레이션 등임

孔聖元(正會員)

1970년 4월 3일생. 1995년 인하대학교 전자재료공학과(공학사). 1995년~현재 삼성전자 반도체연구소 연구원. 주관심분야는 반도체 공정 물리, 묘화 공정 등임



李濟熙(正會員)

1968년 10월 5일생. 1992년 인하대학교 응용물리학과(공학사). 1994년 인하대학교 전자재료공학과(공학석사). 1994~현재 인하대학교 전자재료공학과 박사과정. 주관심분

야는 반도체 소자, 공정 물리, 시뮬레이션 등임



元太映(正會員)

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. 1990년~1991년 삼성전자(주) 수석연구원. 1991년~현재 인하대학교 공과대학 전자재료공학과 부교수. 주관심분야는 반도체 소자 및 공정 등임