

SOI소자 제조를 위한 ZMR공정에 대한 모델링

왕 중희, 김 도현
한국과학기술원 화학공학과

Modelling of ZMR Process for Fabrication of SOI

Jong Hoe Wang, Do Hyun Kim
Dept. of Chemical Engineering, KAIST

서론

SOI(Silicon-on-Insulator)란 절연체나 절연층 위에 단결정 실리콘 박막을 형성시킨 구조를 말하며, SOI소자는 구조상의 많은 잇점을 가지고 있다. 그리고 소자가 고집적화 됨에 따라, SOI기판을 사용하는 집적회로 소자는 벌크기판을 사용하는 경우보다 더 좋은 성능을 보인다[1].

소자 제조용 SOI기판을 만들기 위한 기술들이 개발되어 왔으며, ZMR(Zone Melting Recrystallization)은 SiO₂와 같은 절연체 위에 있는 다결정 실리콘 박막을 만들고 난 후에 이를 집속된 열원을 이용해 재결정화 시키는 방법이다. 이때, capping oxide는 실리콘 박막이 불순물에 노출되는 것을 막고, 용융부의 열적 안정성을 개선하기 위해서 사용된다[2].

지금까지 ZMR공정의 가장 큰 결점은 열원에 관계없이 용고방향과 평행하게 연속적인 아결정립계(subboundary)가 형성되어 박막의 결함밀도가 커지는 것이며 [3] ZMR공정에 의해 SOI소자를 제조할 때, 단결정을 성장시키는 동안의 고상과 액상사이의 두 계면의 형상, 전체 계에서의 온도장 그리고 용융부의 폭은 ZMR공정에서 있어서의 결정 결함 밀도에 영향을 미치는 중요한 인자이다. 하지만, ZMR공정시의 온도장을 실험적으로 측정하는 것은 매우 힘들다. 따라서, ZMR공정에서의 열전달 공정을 더욱 확실하게 이해하고, 결정결함이 없는 단결정을 성장시키기 위해서 열전달 공정을 정확하게 모사할 수 있는 모델을 만드는 것이 필요하며, 이에 대한 많은 연구가 진행되어 왔다[4, 5]. 하지만 대부분의 연구들은 일차원 모델을 사용하였으며, 이차원 모델을 사용하여 온도장에 대한 여러 공정 변수의 영향을 고찰하기도 하였다. 하지만 ZMR공정에 있어서 중요한 영향을 미치는 계면의 형상을 고찰하거나 용융부에서의 대류열전달을 고려하지는 못하였다.

본 연구는 SOI구조를 얻기 위한 ZMR공정 중의 열전달공정을 모사할 수 있는 모델을 만드는 것을 목적으로 한다. 본 연구에서는 2개의 자유 경계면 및 전체 계의 온도장을 구할 수 있는 모델을 만들어 ZMR공정을 수치적으로 해석하였다. 이때 정확한 열전달 공정의 모델링을 위하여 실리콘 기판 용융부의 유동장을 함께 구하여 대류 열전달을 포함하였으며, SOI구조의 위, 아래 면에서의 대류, 전도, 복사 열전달을 포함하였다. 상부 열원 복사강도의 변화와 스캔속도등과 같은 공정 변수들의 변화에 따른 온도장과 유동장 그리고 계면의 형상과 폭의 변화를 알아보았다[6].

ZMR 공정에 대한 모델

ZMR 공정은 아랫면과 윗면에서의 복사열전달에 의해 온도장이 결정되어지는 열전달공정이다. ZMR 모델에서의 좌표계는 원점을 기판의 왼쪽 아래 꼭지점으로 잡았다. 기판에 수직방향이 x방향이며 수평방향이 y방향이다.

ZMR SOI에 대한 수학적 모델의 geometry는 각 박막이 1 μ m이며, 실리콘 기판

은 $625 \mu\text{m}$ 이다. 각 상의 열-물리적인 성질이 다르며, 이것에 의해 각 상이 특성 지워진다.

무차원화 시키기 위한 특성변수들은 다음과 같다. 특성길이는 웨이퍼의 수평길이(L)로 5cm 이며, 특성압력은 $\rho_{\text{Si,m}} \alpha_{\text{Si,m}}/L^2$ 이며, 특성속도는 $\alpha_{\text{Si,m}}/L$ 이다. 여기서, $\rho_{\text{Si,m}}$ 는 액상 실리콘의 밀도이며, $\alpha_{\text{Si,m}}$ 은 액상 실리콘의 열확산계수이다. 액상 실리콘을 부시네스크 유체로 가정하여 대류는 온도변화에 의한 밀도차에 의해 유도된다.

액상의 실리콘 내에서의 이차원 정상상태 연속식, 운동 방정식, 에너지식과 고상 실리콘과 절연층(SiO_2)에서의 에너지식에 의하여 모델을 수립하였다.

고상 실리콘과 액상 실리콘 사이 계면의 위치는 해의 일부로 구해지며 다음과 같은 열역학적인 평형조건에 의하여 그 위치를 구한다. 이때 θ_m 은 실리콘의 용융온도이다.

$$\theta = \theta_m \quad (1)$$

ZMR SOI에 대한 경계조건중 온도를 결정하기 위한 경계조건은 다음과 같이 표현된다.

$$-\left[\frac{\partial \theta}{\partial x} \right]_{x=x_i} = q_g \varepsilon_i + Bi_i (\theta_{\infty, T} - \theta) \quad (2)$$

$$\left[\frac{\partial \theta}{\partial x} \right]_{x=0} = q_c \varepsilon_i + Bi_i (\theta_{\infty, B} - \theta) \quad (3)$$

$$[\theta]_{v=0 \text{ or } v=l} = 0 \quad (4)$$

여기서, q_g 는 가우스 분포를 가지는 상부 열속이며, 계산상의 편의를 위하여 cosine함수로 근사하여 사용하였다[2]. q_c 는 기판의 예열에 의한 균일한 열속을 나타낸다. 그리고, ε_i 는 각 상에서의 복사능을 나타내며 Biot수는 $Bi_i = hL/k_i$ 로 정의되며 i 는 각 상에 해당함을 나타내며, 주위와의 대류, 전도열전달을 고려하기 위한 무차원수이다. 웨이퍼 윗 면에서 $\theta_{\infty, T}$ 를 상온으로 잡았으며, 아랫면에서의 $\theta_{\infty, B}$ 는 예열온도로 잡았다.

스캐닝 속도가 0이 아닌 경우에는 잠열이 영향을 미치며 이는 고-액 계면의 열수지와 잠열 발생함에 의하여 고려하였다.

속도를 결정하기 위한 경계조건은 경계면에서 안미끄러짐 조건을 사용하였다.

수치해법

본 연구에서는 모델식으로부터 수치해를 구하기 위해 유한요소법을 사용하여 차분화시켰으며 기초함수로서 용융부에서의 속도와 전체계에서의 온도에 대해서는 biquadratic basis function을, 실리콘 용융부에서의 압력에 대해서는 discontinuous piecewise linear basis function을 사용하였다. 그리고 실리콘의 액상과 고상사이의 계면의 위치는 one-dimensional quadratic basis function을 사용하였다. 유한요소로서는 9 마디 Lagrangian finite element를 사용하였다.

이때 생성된 비선형 방정식을 선형화하기 위해서 Newton-Raphson법을 사용하였으며, 이때 얻어지는 Jacobian matrix는 sparse, 띠행태를 가지고 있다. 즉 요소들의 대부분은 영이며 영이 아닌 요소들은 대각선 주위에 띠행태를 취하게 된다. 이러한 선형대수방정식의 특성을 이용하여 효율적인 계산을 위하여 Hood의 frontal solver[7]를 사용하였다. 따라서 모델식의 해인 온도, 속도, 경계면의 위치들은 동시에 얻어지게 된다.

결과 및 토의

표준 공정 조건을 상부열원의 최대복사강도 I_{peak} 이 6 W/cm^2 이고 스캔속도 V_s 는 $0 \mu\text{m/sec}$ 이며, capping oxide의 두께는 $1 \mu\text{m}$ 로 잡았다. 표준 공정 조건에서의 결과로부터 많은 다른 연구가들에 의해 행해진 일차원 가정이 어느 정도 타당함을 알 수 있었다. 하지만 계면이 완전히 평편하지 않음을 알 수 있었으며 이는 더 높은 차수의 모델이 필요함을 나타낸다. 기판 윗면에서 기판에 수평한 방향으로의 온도분포는 종 모양을 띄고 있으며, 기판의 가운데면에서 위에서부터의 수직 방향으로의 온도분포를 보면 실리콘과 절연층의 열-물리적인 성질이 다름으로 인해서 온도기울기가 급격하게 변화함을 알 수 있었다.

본 수학적 모델은 온도장에 대한 대류의 영향을 알아보기 위해서 용융부에서의 유동장을 포함하였으며, 온도장에 대한 대류의 영향은 그다지 크지 않음을 알 수 있었다.

상부열원의 최대복사강도의 변화에 따른 영향을 Figure 1에 나타내었다. 상부열원의 최대복사강도가 증가함에 따라 θ_{max} 와 용융부에서 계면사이의 폭이 선형적으로 증가한다. 대류에 대한 구동력이 증가함에 따라 ψ_{max} 도 선형적으로 증가한다. 상부 열원의 최대복사강도가 증가함에 따라 실리콘 기판에서의 계면 형태가 특히 평편해짐을 알 수 있었다.

고/액 계면이 움직이는 경우에는 잠열효과가 온도장에 영향을 미치게 된다[8, 9]. 계면의 이동속도에 대한 가장 중요한 변수는 상부 열원의 이동속도이다. 상부 열원 이동속도의 영향을 고찰하기 위해서, 본 연구에서는 스캔속도의 변화에 따른 영향을 고찰하였다. 스캔 속도가 증가함에 따라 온도장의 대칭이 깨어지게 된다. 그리고 기판 용융부의 오른쪽 계면(두 번째 계면)의 곡률이 증가하게 되며, 왼쪽 계면의 곡률은 감소함을 알 수 있었다.

Capping oxide두께의 변화에 따라 고상 및 액상의 복사능이 변화하게 되며[3], 이것의 영향을 Figure 2에 나타내었다. 복사능이 극대점을 가짐으로 인해 온도장에 영향을 미치게 되며, 온도장의 변화는 유동장에 영향을 주게 된다. 따라서 열대류가 증가하게 된다. 이러한 영향으로 인해 θ_{max} , ψ_{max} 그리고 용융부의 폭이 Figure 2에서 볼 수 있듯이 극대점을 보이게 된다.

SOI 소자와 주위와의 전도와 대류에 의한 열전달의 영향을 고찰하였다. Biot수는 고상의 실리콘과 액상의 실리콘의 열-물리적인 성질이 다름으로 인해서 위치에 따라 달라지게 된다. Biot수가 증가함에 따라, 윗면과 아랫면에서의 열손실이 증가함에 따라 계면의 곡률이 증가하게 된다.

참고문헌

- 1) Sze, S. M.: VLSI Technology, McGraw-Hill Inc.(1969).
- 2) Im, I. G.: PhD Thesis, Seoul National University(1992).
- 3) Yoon, B. J.: PhD Thesis, KAIST(1993).
- 4) Mertens, P. W.: PhD Thesis, Katholieke Universiteit Leuven(1991).
- 5) Miaoulis, I. N., P. Y. Wong, S. M. Yoon, R. D. Robinson, and C. K. Hess: *J. Electrochem. Soc.*, (9), 139, 2687(1992).
- 6) Wang, J. H.: Master Thesis, KAIST(1995).
- 7) Hood, P.: *Int. J. Num. Meth. Eng.*, 10, 379(1976).
- 8) Brown, R. A., and Hisham M. E.: *J. Comput. Phys.*, 49, 118(1983).
- 9) Kim, D. H.: ScD Thesis, MIT(1990).

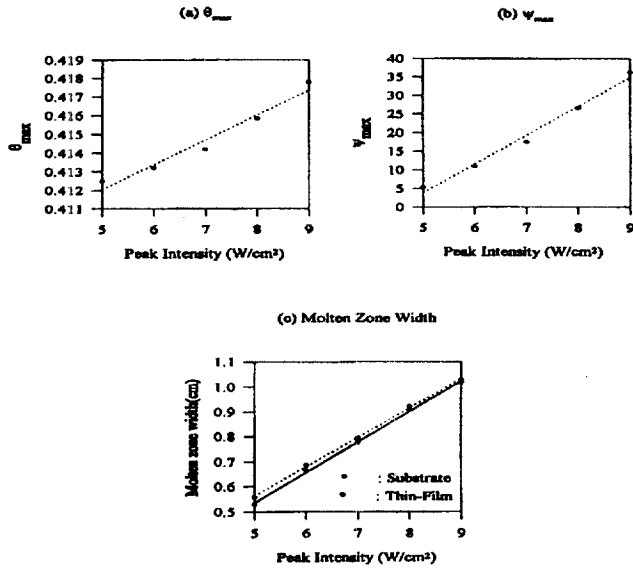


Figure 1. The effects of I_{peak} on (a) θ_{max} , (b) ψ_{max} and (c) molten zone width.

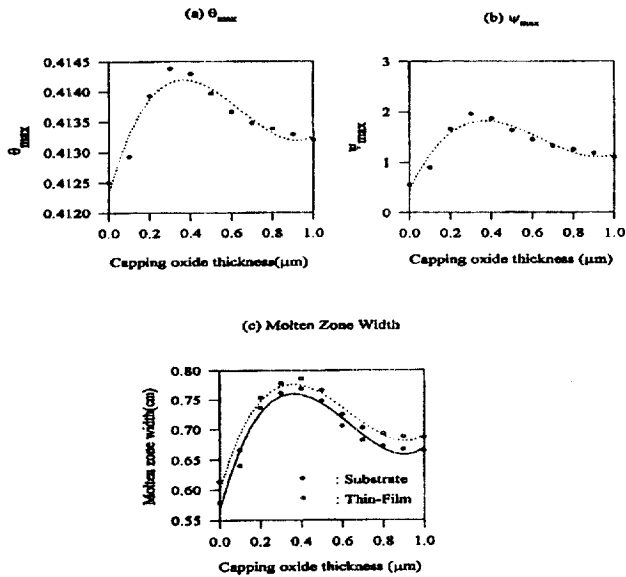


Figure 2. Effects of the capping oxide thickness on (a) θ_{max} , (b) ψ_{max} and (c) molten zone width.