

## 저압화학증착공정에서 미세선평 도랑내의 박막 형성에 대한 전산 모사

정찬화 · 윤형진\* · 박신중\* · 문상흠

서울대학교 화학공학과

\*한국전자통신연구소

(1991년 5월 3일 접수, 1991년 6월 27일 채택)

### Simulation of Film Growth in Narrow Deep Trench by Low Pressure CVD

Chan Hwa Chung, Hyung-Jin Yoon\*, Sin Chong Park\* and Sang Heup Moon

*Dept. of Chemical Engineering, Seoul National University, Seoul, Korea*

*\*The Electronics and Telecommunications Research Institute, Taejeon, Korea*

(Received 3 May 1991; accepted 27 June 1991)

#### 요 약

저압화학증착에 의해 좁고 깊은 도랑내에 증착되는 박막의 증착률 특성을 모델링 및 전산모사를 통하여 관찰하였다. 반응물의 표면충돌빈도수가 박막의 성장속도를 결정한다고 가정한 가시각 모델과 반응물이 Knudsen 확산기구에 의해 도랑내로 확산되어 들어간다고 가정한 Knudsen 확산 모델을 기초모델로 하여 전산모사를 수행하였으며, 실제의 증착공정을 모사하기 위해 위의 두 모델을 적절히 배합한 모델로도 전산모사하였다. 이 모델들을 바탕으로 실리콘이오 벽면은 산화규소인 가늘고 긴 원통형도랑내에서 텅스텐의 화학증착이 일어나는 경우에 대해 적용하여 다음의 결과를 얻었다. 증착률은 도랑이 좁고 깊을수록 나빠지며, 이를 개선하기 위해선  $H_2/WF_6$ 의 비를 낮추거나 온도와 압력을 높여야 한다. 또한, 도랑의 벽면에 약간의 경사를 주는 기하학적 구조를 변화시키는 방법으로도 증착률을 크게 개선시킬 수 있다.

**Abstract**—A few basic models have been suggested to simulate the film growth contour in narrow deep trench by low pressure chemical vapor deposition(LPCVD). Among them, the arrival-angle model assumes that the film growth rate depends on the collision frequency of reactant molecules with the substrate surface, and Knudsen-diffusion model assumes that the reactant diffuse into the trench volume by the Knudsen-diffusion mechanism. A third model combines the algorithm of the above two models in the computation process. For demonstration, these models have been applied for simulation of tungsten film deposition and the following results are obtained. The step coverage is poor when the aspect ratio of trench increases, but is improved when the  $H_2/WF_6$  ratio decreases and the process temperature and pressure increase. The step coverage by tungsten film is improved when the trench is slightly tapered on both sides.

#### 1. 서 론

화학증착법은 물리증착법과는 달리 다양한 화합물의

박막을 제조할 수 있을 뿐만이 아니라 비교적 단순하고 저렴한 증착장치를 사용하여 균일한 품질의 박막을 빨리 제조할 수 있기 때문에 반도체 소자의 제조 공정에서

광범위하게 쓰인다. 또한, 기판(substrate)의 종류에 따라서 박막을 선택적으로 증착시킬 수가 있어서 복잡한 표면구조를 가진 기판위에 박막을 제조하는데에는 물리증착법보다 훨씬 유리하다[1].

그러나 이같은 화학증착법도 폭이 매우 작은 도랑(trench)이나 깊이/폭의 비(aspect ratio)가 큰 구멍속에서 박막을 형성할 때에는 그 증착조건을 정확하게 조절해 주어야 한다. 즉, 폭이 좁고 깊은 도랑에 박막을 증착시킬 때에는 도랑 내부의 위치에 따라서 박막의 성장속도가 달라지고 이로 인하여 도랑내에 채워진 박막의 내부에 빈 공간(void)이 형성될 수가 있다. 이처럼 도랑내에 채워진 박막중에 빈 공간이 생기면 박막의 전기전도도가 나빠져서 반도체 소자의 기능에 치명적인 영향을 준다. 이 문제는 특히 최근에 소자의 집적도가 높아지면서 가공선폭이 1 마이크로 이하로 작아지고 또한 3차원의 다층배선 연결을 위하여 연결구멍(via hole) 등을 사용하게 됨에 따라서 점점 심각해 지고 있다.

이 연구에서는 이처럼 굴곡이 심한 기판위에 저압 화학증착법으로 박막을 형성하는 경우에 공정조건에 따라서 충당률(step coverage)의 특성이 변화하는 현상을 몇 가지 모델에 기초를 둔 전산모사 방법으로 관찰하였다. 구체적인 모사 대상으로는 선폭이 1마이크론 이하이고 깊이가 다양한 도랑내에 텅스텐 박막을 1 torr 이내의 저압에서 화학증착법으로 제조하는 경우를 택하였다. 텅스텐 박막의 성장에 대한 전산모사는 이미 다른 학자들에 의하여 시도되었지만[2, 3], 이 연구에서는 그들보다는 좀더 일반적인 기초 모델들을 제시하고 이 모델들을 사용하여 텅스텐의 박막성장 특성을 모사하였다. 이 연구에 사용된 기초모델과 해석방법은 텅스텐 박막 뿐만이 아니라 다른 박막의 경우에 대하여도 그대로 적용할 수가 있다.

아래에서는 이 연구에서 사용된 전산모사의 기초모델, 해석방법 등을 소개하고 이 방법을 구체적으로 텅스텐의 박막성장에 대하여 적용된 결과를 제시하였다.

## 2. 화학증착공정의 모사

### 2-1. 기초 모델

저압화학증착은 반응물의 압력이 보통 1 torr 이하인 범위에서 이루어지기 때문에 반응물의 평균자유행로(mean free path)가 약 50  $\mu\text{m}$ 에 이른다. 한편, 근래에 제조되는 ULSI 제품에서의 도랑의 폭은 1  $\mu\text{m}$  이하로서 반응물의 평균자유행로보다 훨씬 작기 때문에 도랑내에서 반응물의 이동은 반응물간의 충돌에 의한 공간확산(bulk diffusion)보다는 반응물이 도랑의 벽면에 충돌

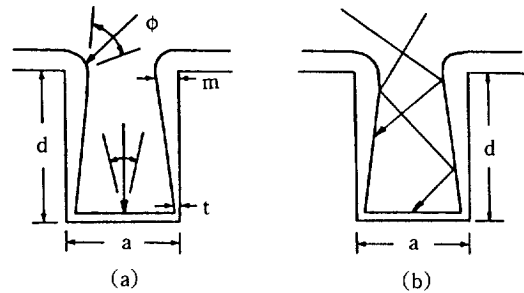


Fig. 1. Models for two extreme cases of LPCVD.

(a) Arrival angle model

(b) Knudsen diffusion model

및 반사하면서 이동하는 Knudsen 확산(Knudsen diffusion)에 의하여 이루어진다.

벽면에 충돌한 반응물은 그 지점에서 표면반응에 의하여 증착되거나 또는 다시 반사되어서 반대편 벽면에 부딪치면서 도랑의 내부로 이동을 하는데, 이 때에 벽면에 충돌한 반응물중의 얼마가 다시 반사되는지는 증착반응의 조건과 충돌면에서의 선택도, 그리고 충돌하는 반응물의 종류에 따라서 달라진다.

실제의 화학증착공정에서는 이렇게 복잡한 과정을 거쳐 박막이 성장하지만, 이를 모사하기 위하여는 1) 벽면에 충돌한 반응물이 거의 모두 그 지점에 증착하는 경우와 반대로 2) 충돌한 반응물이 거의 모두 반사되는 경우의 두 가지 극단적인 경우에 대하여 기초 모델을 설정할 수 있다. 그래서, 실제 공정에서는 벽면에 충돌한 반응물의 일정한 분율만이 화학반응에 의하여 분해 및 증착되는데, 이것은 위의 두 가지 기초 모델을 적절히 배합함으로써 공정모사를 할 수가 있다. 아래에서는 이 연구에서 사용된 두 가지의 기초 모델에 대하여 설명 하겠다.

#### 2-1-1. 가시각 모델(Arrival Angle Model)[4, 5]

가시각 모델은 도랑의 벽면과 충돌한 반응물이 모두 그 자리에서 반응하여 박막을 형성한다고 본 것으로 반응물의 부착계수(sticking coefficient)가 1인 경우에 해당된다. 이 모델은 반응물이 벽면에 충돌하는 빈도(collision frequency)에 비하여 표면에서의 증착반응 속도가 매우 빠를 때에 적용되며, 따라서 박막의 증착 속도는 그 지점에서 반응물의 충돌빈도에 의하여 결정 된다. 이 모델은 이미 SAMPLE 등과 같은 기존의 simulator에서 식각이나 증착공정의 전산모사에 주로 사용되고 있다[6].

한편, 반응물이 벽면에 충돌하는 빈도는 Fig. 1(a)에서 보는 바와 같이 벽면의 각 위치에 따라 다른데, 이 모델에서는 그 빈도가 각 지점에서 기상 방향(bulk phase)

으로 열린 가시각(angle of view)에 의하여 결정된다고 보았다. 앞서도 언급한 바와 같이 저압화학증착공정에서는 반응물의 평균자유행로가 도랑의 폭이나 깊이보다 훨씬 크기 때문에 반응물은 다른 반응물과의 충돌이 없이 그대로 도랑 표면과 충돌하게 된다. 이 경우에 기상중의 반응물이 입의 방향으로 움직인다면 도랑 벽면의 어느 지점에서 반응물의 충돌빈도는 그 지점에서 기상 방향으로 열린 가시각에 비례한다고 보는 것이 타당하다.

즉, 주어진 지점에서 박막 성장속도( $G$ )는 아래와 같이 표시된다.

$$G = (T/180) \cdot G_0 \quad (1)$$

여기서  $T$ 는 각 표면점에서의 가시각이고  $G_0$ 는 굴곡이 없는 평면( $T=180^\circ$ 인 경우)에서의 박막 성장속도이다.

한편, 도랑 내부에 증착되는 박막은 각 위치에서 표면에 수직인 방향으로 성장하게 된다. 전산기를 사용한 실제의 계산에서는 아래의 두 식에 표시된 것처럼 정해진 표면 좌표점과 인접한 두 개의 좌표를 잇는 두 선이 이루는 각을 이등분하는 방향으로 박막이 성장한다고 계산하였다. 이 방법은 일명 String Model이라고 불리운다[7].

$$\sqrt{(x_i - x_{i-1})^2 + (y_i - y_{i-1})^2} = G \quad (2)$$

$$\sqrt{(x_i - x_{i-1})^2 + (y_i - y_{i-1})^2} = \sqrt{(x_i - x_{i+1})^2 + (y_i - y_{i+1})^2} \quad (3)$$

여기서  $x_i, y_i$ 는  $i$ 번째 좌표점을 말하고  $x_i, y_i$ 는 새로 얻어진  $i$ 번째 좌표점을 뜻한다.  $i-1$ 과  $i+1$ 은 각각  $i$ 번째 좌표점에 인접한 두 점을 표시한다.

본 연구에서는 각각의 점( $x_i, y_i$ )에서 그 점의 가시각을 계산한 뒤에 위의 식들을 만족하는 새로운 좌표점( $x_i, y_i$ )을 Newton 방법에 의해 찾아내었다. 또한 매시간 step마다 string point들을 등간격으로 다시 설정해 줌으로써 string 상의 각 element들의 크기가 균일하도록 유지시켜 오차를 줄여 주었다.

## 2-1-2. Knudsen 확산 모델(Knudsen Diffusion Model)

Knudsen 확산 모델은 가시각 모델과는 반대로 표면에 충돌한 반응물중의 극히 일부분만이 그 자리에서 반응하고 나머지는 반사되어서 나가는, 즉 부착계수가 거의 0인, 경우에 해당되는 것으로서 표면의 증착 반응속도가 반응물의 충돌빈도에 비하여 느릴 때에 잘 맞는다[Fig. 1(b) 참조]. 이 모델에서는 반응물이 도랑 내에서 이동하는 방법이 벽면과의 충돌 및 반사에 의한 Knudsen 확산이라고 보아야 한다. 따라서, 확산계수( $D$ )

는 아래와 같이 도랑의 폭( $r$ )에 따라 변할 뿐 반응물의 압력에는 무관하게 나타난다.

$$D = A \cdot r \quad (4)$$

이 모델에서는 반응물이 Knudsen 확산에 의하여 도랑 내부로 이동하는 현상과 그 중의 일부가 도랑의 표면에 서서히 증착하는 현상이 동시에 일어난다고 본다 [8].

즉, 폭이 좁고 깊은 원통형 도랑내에서의 증착공정에 대한 지배방정식은 다음과 같이 주어진다.

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} (\pi r^2 LDC) - 2\pi r LG = \frac{\partial}{\partial t} (\pi r^2 LC) \quad (5)$$

여기서  $r$ 은 원통형 도랑의 반경,  $L$ 은 도랑의 길이,  $C$ 는 반응물의 농도이며,  $G$ 는 벽면에서의 증착 반응속도이다. 이 방정식은 폭이 좁고 깊은 도랑에 대한 것이기 때문에  $r$ 방향으로의 반응물 농도는 균일하다고 보았다. 식 (4)와 (5)를 연결하여 다시 정리하면 아래의 식이 얻어진다.

$$Ar^2 \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + 3Ar \frac{\partial r}{\partial z} \frac{\partial C}{\partial z} - 2G = r \frac{\partial C}{\partial t} + 2C \frac{\partial r}{\partial t} \quad (6)$$

여기서  $G$ 는 온도와 반응물 농도의 함수로 주어지는데, 이 함수의 형태는 증착반응 및 기판의 종류에 따라서 다르다. 대개의 화학증착공정에서 도랑 내부의 온도는 비교적 균일하지만 반응물 농도는 도랑의 밑으로 갈수록 감소하기 때문에  $G$ 값은 도랑 내부의 깊이에 따라 달라진다.

한편, 증착이 진행됨에 따라서 도랑의 폭은 점차로 좁아지므로 시간에 따른  $r$ 의 변화는 다음과 같다.

$$\frac{\partial r}{\partial t} = -\frac{G}{C_m} \quad (7)$$

여기서,  $C_m$ 은 증착되는 박막물질의 몰 밀도(molar density)이다. (7)식을 (6)식에 대입하면 다음 식이 얻어진다.

$$Ar^2 \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + 3Ar \frac{\partial r}{\partial z} \frac{\partial C}{\partial z} + 2G \left( \frac{C}{C_m} - 1 \right) = r \frac{\partial C}{\partial t} \quad (8)$$

이 때의 경계조건은 아래와 같다. 모든  $t$  값에 대하여,

$$z=0 \text{ 일 때, } C=C_0 \quad (9-1)$$

$$z=L \text{ 일 때, } \frac{\partial C}{\partial z} = -\frac{G}{D} \quad (9-2)$$

한편, 초기 조건은 반응 초기에 도랑내에서의 반응물 농도 분포가 정상상태에 있다고 가정하여 다음과 같이 주어진다. 즉,  $t=0$ 일 때 모든  $z$ 값에 대하여

$$\frac{\partial C}{\partial t} = 0 \quad (9-3)$$

본 연구에서는 IMSL(ver 9.0) Routine DPDES로 매 시간마다 (8)식을 풀어서 도랑내의 반응물 농도분포를 얻었으며, 이 때 도랑 바닥에서 반응물의 고갈이 나타나면 그 시간 step에서 바닥에서의 박막 성장은 정지된다고 하여 전산모사하였다.

## 2-2. 배합 모델(Combined Model)

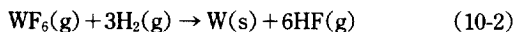
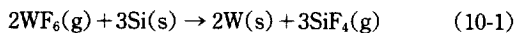
앞서도 설명한 바와 같이 실제의 화학증착공정에서는 도랑 표면에 충돌한 반응물중에 일부는 증착되고 나머지는 반사되어 나가는데(즉, 부착계수가 0과 1사이), 이것은 위에서의 두 가지 기초 모델을 적절히 배합하여 모사할 수가 있다. 즉, 매 시간 간격마다 한번은 가시각 모델을 사용하여 도랑 벽면의 좌표를 결정하고 한편으로는 같은 시간 간격에 대해 다시 한번 Knudsen 확산 모델로 벽면의 좌표를 결정한 뒤에, 두 모델간에 주어진 가중치에 따라서 새로운 벽면의 좌표를 계산해 나가는 방법을 사용하였다. 이 배합 모델에서 가중치를 적절히 조절하면 실제 공정과 유사한 박막성장형태를 모사할 수가 있다.

## 3. 텅스텐 화학증착의 모사

앞에서 설명한 모델들을 밑바닥은 실리콘이고 벽면이 산화규소인 가늘고 긴 원통형 도랑(trench) 또는 구멍(hole)내에서 텅스텐의 화학증착이 일어나는 경우에 대하여 적용하여 보았다.

### 3-1. 텅스텐 화학증착의 반응속도식

WF<sub>6</sub>에 의한 텅스텐 박막의 화학증착은 아래와 같이 크게 두 가지의 화학반응에 의해서 이루어지는데 하나는 실리콘에 의한 WF<sub>6</sub>의 환원반응이고 또 하나는 수소에 의한 WF<sub>6</sub>의 환원반응이다.



그러나 실리콘에 의한 환원반응은 증착공정의 초기에 급격히 일어나서 일정한 두께의 텅스텐 박막을 형성하고, 그 후부터는 WF<sub>6</sub>와 실리콘간의 접촉이 불가능해지므로 단지 수소에 의한 환원반응만이 일어나게 된다. 따라서 증착공정의 대부분의 시간중에는 수소에 의한

WF<sub>6</sub>의 환원반응만이 중요하다고 보아도 무방하다.

수소에 의한 WF<sub>6</sub>의 분해 반응에 대한 반응속도식은 아래와 같이 주어진다[15].

$$G_{Si} = \frac{K_1 P_{H_2}^{1/2} P_{WF_6}^{1/6}}{1 + K_2 P_{WF_6}^{1/6}} \quad (11)$$

그러나 문헌에 의하면 K<sub>2</sub>가 비교적 큰 값을 가지므로 일반적으로 텅스텐의 흡착 속도는 WF<sub>6</sub>의 분압에는 무관하고 수소분압에만 의존하는 아래의 식으로 표시된다.

$$G_{Si} = k P_{H_2}^{1/2} \quad (12)$$

문헌에 보고된 실험결과[16-19]로부터 반응속도상수(k)를 구하면 윗 식은 다음과 같이 된다.

$$G_{Si} = (0.5/60) \exp(-8800/T) P_{H_2}^{1/2} \quad (13)$$

[moles/cm<sup>2</sup> sec]

여기서 P<sub>H<sub>2</sub></sub>의 단위는 torr이고 T는 K로 표시된다.

실제의 공정에서는 보통 WF<sub>6</sub>보다 H<sub>2</sub>를 과량으로 사용하므로 반응중에 수소기체의 분압은 거의 변하지 않는다. 따라서 G<sub>Si</sub>값은 도랑내에서의 위치나 공정시간에 관계없이 일정하게 유지된다고 볼 수 있다.

### 3-2. 화학증착의 선택도(Selectivity)

화학증착법에 의한 텅스텐의 박막제조에서 큰 잇점은 텅스텐이 도랑의 벽면인 산화규소의 표면에는 증착되지 않고 도랑의 바닥에 있는 실리콘의 표면에만 증착된다는 것이다. 그러나 실제의 공정에서는 이같은 텅스텐 증착의 선택도가 끝까지 유지되지가 못하고, 공정이 진행되면서 서서히 떨어지게 된다.

McConica[12]의 관찰에 의하면 산화규소 위에서의 텅스텐의 핵성장은 시간에 따라 exponential하게 증가하는 것으로 나타났다. 텅스텐 증착의 선택도(S)를 (산화규소 표면에서의 성장속도)/(실리콘 표면에서의 성장속도)로 정의했을 때에 S는 시간에 따라서 다음과 같이 표시된다.

$$S = \exp(t/\zeta) - 1, \quad 0 \leq S \leq 1 \quad (14)$$

즉, S는 증착초기에는 0으로서 완전히 선택적인 증착이 이루어지다가 시간이 경과하면서 서서히 1에 접근하여 비선택적 증착(또는 전면성 증착: Blanket CVD)이 된다.

위의 식에서 선택도계수(ζ)는 H<sub>2</sub>/WF<sub>6</sub>의 비, 반응압력, 온도 등의 반응조건에 따라서 결정된다.

예를 들어 전체 압력이 0.3 torr 이하, H<sub>2</sub>/WF<sub>6</sub>의 비가 30 이상, 온도가 600 K 이하인 경우에는 선택도가 좋지만, 그 반대의 범위에서는 선택도가 크게 나빠진다.

Table 1. Selectivity fraction used for calculating the selectivity coefficient( $\xi$ )

Process variable Selectivity	Total pressure		$H_2/WF_6$ ratio		Temperature	
	Condition	Fraction	Condition	Fraction	Condition	Fraction
Good	<0.3 torr	10	>30	12.6	<600 K	17.5
Poor	>0.3 torr	2.5	<30	2.5	>600 K	1.25

이 연구에서는 각 공정조건을 선택도가 양호하거나 또는 불량한 두 가지 범위로 나누고, 각 범위에 대하여 선택도 계수의 분율을 Table 1에서와 같이 주었다. 여기서 선택도 분율은 문헌에서의 실험결과[13, 14]와 일치하도록 작성된 것이다. 예를 들어, 전체 압력이 0.2 torr,  $H_2/WF_6$ 비가 10, 그리고 반응 온도가 700 K일 때를 보면, Table 1에서 각 조건의 선택도 분율이 각각 10, 2.5, 1.25로 주어지므로 선택도 계수값은  $13.75 (= 10 + 2.5 + 1.25)$ 이고 따라서  $S = \exp(t/13.75) - 1$ 이 된다.

따라서 Knudsen 확산 모델의 경우에 식 (8)의 지배방정식에 포함된 박막 증착속도( $G$ )는 실리콘 표면에서는  $G_{Si}$ 로 표시되지만 산화규소의 표면에서는  $S \cdot G_{Si}$ 로 표시된다.

#### 4. 결과 및 검토

좁고 깊은 도랑(또는 구멍)내에서 텅스텐의 화학증착이 일어나는 경우에 대하여 앞의 모델들을 적용하여 전산모사(IMSL Version 9.0 Routine DPDES 사용)를 한 결과가 아래에 표시되었다. 우선 이들 결과의 특징을 나타내기 위하여 아래의 인자들을 정의하였다(Fig. 1 참조).

$$AR(\text{Aspect Ratio}) = \frac{\text{도랑의 깊이}}{\text{도랑의 폭}} = \frac{d}{a}$$

$$WTR(\text{Wall Thinning Ratio})$$

$$= \frac{\text{도랑바닥 벽면의 박막두께}}{\text{도랑입구 벽면의 박막두께}} = \frac{t}{m}$$

위에서 AR은 초기에 사용한 도랑의 기하학적 형태를 나타내며, WTR가 1에 가까울수록 도랑은 박막에 의하여 잘 채워졌다고 볼 수가 있다.

##### 4-1. 각 모델의 비교

도랑의 AR이 1 또는 2인 경우에 두 가지의 기초 모델과 이들을 1:1로 배합한 배합 모델을 사용하여 모사한 대표적인 결과가 Fig. 2에 표시되었다. 여기서 보면 Knudsen 확산 모델보다는 가시각 모델의 경우에 WTR값이 모두 작게 나타나서, 도랑의 내부에 빈 공간이 더욱 심하게 형성되는 것을 알 수 있다. 한편, 두 가지 모델을 1:1로 배합한 경우에는 도랑 내부의 빈공간도

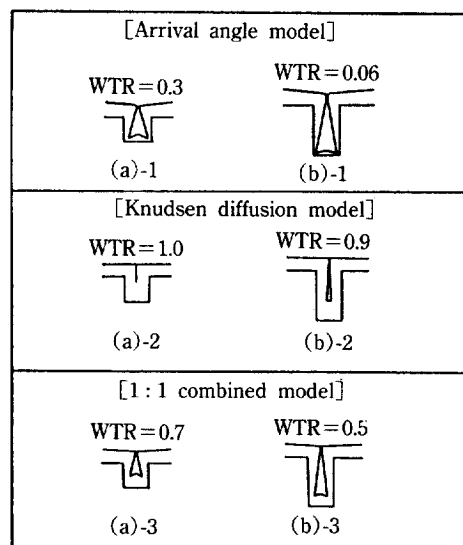


Fig. 2. Film-growth contour.

aspect ratio: (a) 1, (b) 2

selectivity:  $S = \text{Min}(1, e^{0.03t-1})$

total pressure: 0.5 torr

$H_2/WF_6$  ratio: (a) 50, (b) 100

temperature: 600 K

중간 정도로 생기게 된다. AR이 큰 도랑의 경우에는 그렇지 않은 경우보다 도랑내의 빈 공간이 더 잘 생기는데, 이 현상은 Knudsen 확산 모델을 사용한 (b)-2의 경우에 뚜렷이 나타난다.

##### 4-2. 공정조건의 영향

###### 4-2-1. 반응압력의 영향

Fig. 3의 결과에서 보면 압력의 범위가 0.1 torr에서 0.8 torr인 경우에는 반응압력을 높일수록 WTR가 증가하여 박막의 충당힘이 개선됨을 알 수가 있다. 이같은 결과는 압력이 증가하면서 선택도는 나빠지지만 반면에 막 성장속도가 크게 증가하여 공정이 짧은 시간안에 이루어지므로 시간경과에 따른 선택도의 악화효과는 줄어 들기 때문이다. 따라서 박막형성의 선택도는 반응압력보다는 반응시간에 더 민감하다는 것을 알 수 있다.

모델별로 보면 Knudsen 확산 모델보다는 가시각 모

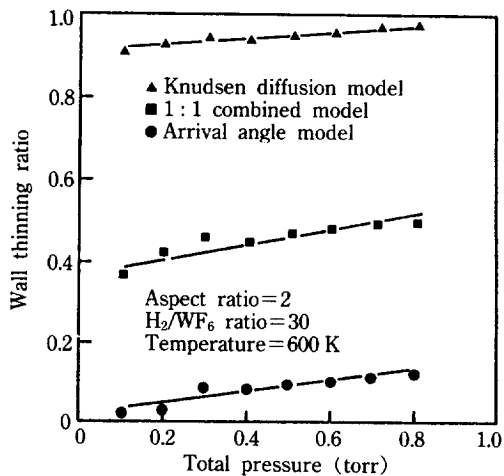
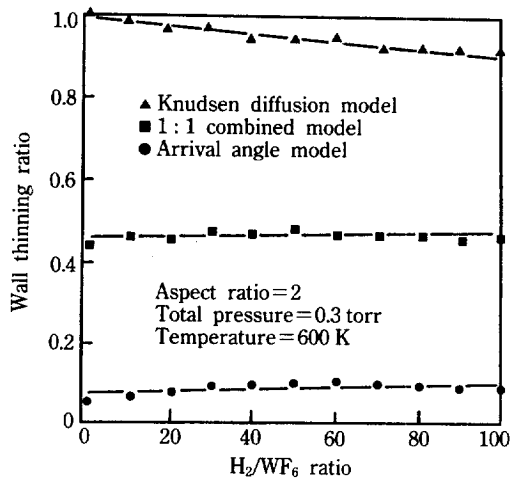


Fig. 3. Effect of total pressure on the wall thinning ratio.

Fig. 4. Effect of  $H_2/WF_6$  ratio on the wall thinning ratio.

델의 경우에서 반응압력에 따른 WTR의 개선이 두드러지게 나타난다. 이 현상은 막 성장속도가 클 경우(즉, 반응압력이 높을 경우)에 선택도가 양호한 초기에 벽면보다도 도랑바닥에서의 막 성장이 두드러지게 되고, 따라서 바닥에서의 shadowing 효과가 줄어들게 되며, 이로 인해 가시각 모델의 충당힘이 개선(WTR 증가)되는 것이다.

#### 4-2-2. $H_2/WF_6$ 의 효과

일반적인 텅스텐 증착의 경우에는  $H_2/WF_6$ 의 비를 100 이상으로 유지하는 것이 보통인데, 이 연구에서 1마이크론 이하의 선폭에 대해 전산 모사한 결과를 보면 이 조건에서는 도랑내에 빈 공간이 생기는 것으로 나타났다.

또한 Fig. 4에서 보듯이 Knudsen 확산 모델과 가시각

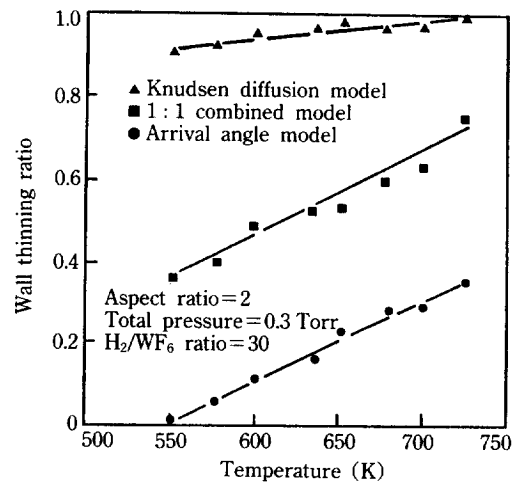


Fig. 5. Effect of temperature on the wall thinning ratio.

모델은 서로 다른 경향을 보임을 알 수 있다. 먼저 Knudsen 확산 모델의 경우에  $H_2/WF_6$ 비를 낮추면(즉,  $WF_6$ 의 농도를 높여 주면) 당연히 도랑내에서의 반응물 고갈은 줄어들게 되고 그러면 도랑내의 빈 공간은 작아지게(WTR이 커지게) 된다.

그러나 가시각 모델의 경우에  $H_2/WF_6$ 비를 낮추게 되면 전체 압력이 일정하다고 할 때 수소의 분압이 낮아지게 되어 이로 인해 박막 형성속도가 급격히 감소하게 되고, 그러면 선택도가 양호한 공정초기에 바닥에서의 막 성장이 둔화되어 결국은 shadowing 효과가 커지고 따라서 충당힘이 불량한 박막을 얻게 된다.

#### 4-2-3. 온도의 영향

텅스텐 박막을 증착시킬 때 선택도에 가장 큰 영향을 미치는 요인은 반응온도인 것으로 알려졌다. 즉, 반응온도를 올리면 선택도는 급격히 악화되며 약 800 K에서는 전면성 증착(Blanket CVD)이 되는 것으로 알려졌다. 그러나 Fig. 5에서 보면 온도를 높여줄수록 오히려 충당힘은 개선(WTR이 증가)되는 것으로 나타났는데, 이것은 앞으로 복잡한 표면 구조의 소자가공에 있어서 활용될 수 있는 가능성을 제시해 주고 있다.

이처럼 온도상승에도 불구하고 도랑내의 박막 충당힘이 개선되는 이유는 선택도가 온도나 압력의 영향보다 증착시간 지연의 영향을 훨씬 더 크게 받고 있기 때문인 것으로 해석된다[12].

즉, 온도가 올라가면 이로인한 선택도 악화가 다소 나타나긴 하지만 반면에 증착속도는 크게 증가하여 증착시간 지연을 줄여주게 되어서 결과적으로 도랑내부가 빨리(선택도가 양호한 때에) 채워지는 것이다.

#### 4-3. 도랑 구조의 영향

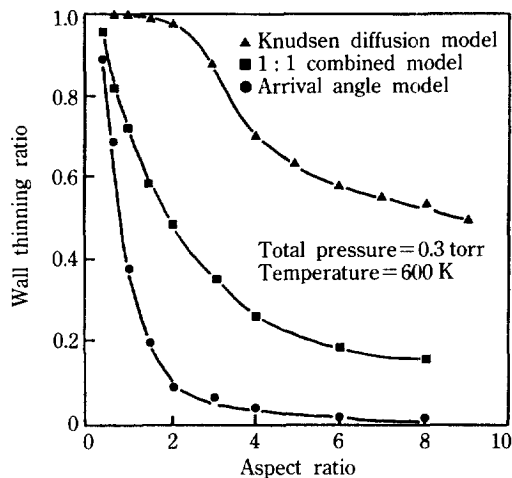


Fig. 6. Effect of aspect ratio on the wall thinning ratio.

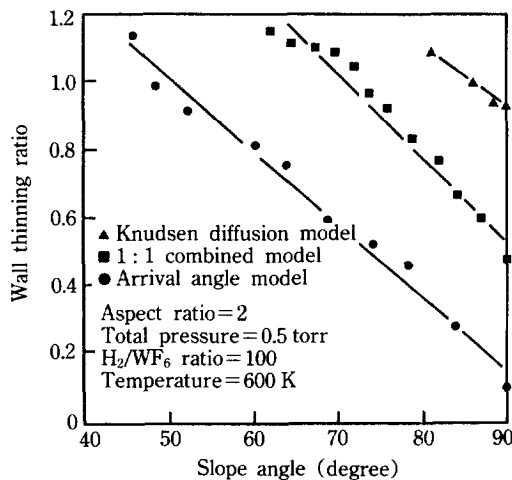


Fig. 7. Effect of slope angle on the wall thinning ratio.

#### 4-3-1. AR(Aspect Ratio)의 효과

앞으로 회로의 집적도가 높은 ULSI의 제조를 위하여는 도랑의 aspect ratio가 4 이상이 되어야 할 것으로 예상되는 바, 이렇게 되면 Fig. 6에서도 보는 바와 같이 WTR이 급격히 감소하고 이로 인해 도랑내에 빈 공간이 생기는 충딕힘 불량이 심해지게 된다. 이처럼 다른 공정조건의 변화에 비하여 AR의 변화는 WTR에 매우 민감한 효과를 주는데, 이 문제를 해결하기 위하여는 반응조건을 최적화하는 등의 공정개선이 필요하다.

#### 4-3-2. 경사진 도랑의 효과

깊은 도랑내의 충딕힘 불량현상을 해결하기 위하여 도랑의 벽면이 비스듬한 경사를 갖는 경우에 대하여 전산 모사를 하였다. 이 계산은 Fig. 7에 표시된 바와 같이

도랑 벽면의 경사도를  $\alpha$ 로 표시하고 도랑 입구의 반경을  $R_1$ 으로 표시한 후에 반경  $r$ 과 도랑깊이  $z$ 간의 다음의 관계식을 도입함으로써 가능하다.

$$r = R_1 - z \cdot \tan \alpha - \frac{S G_{si}}{C_m} t \quad (15)$$

식 (15)를 식 (8)에 대입하여 정리하면 다음의 지배방정식이 얻어진다.

$$A \left( R_1 - z \cdot \tan \alpha - \frac{S G_{si}}{C_m} t \right)^2 \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - 3A \cdot \tan \alpha \left( R_1 - z \cdot \tan \alpha - \frac{S G_{si}}{C_m} t \right) \frac{\partial C}{\partial z} + 2S G_{si} \left( \frac{C}{C_m} - 1 \right) = \left( R_1 - z \cdot \tan \alpha - \frac{S G_{si}}{C_m} t \right) \frac{\partial C}{\partial t} \quad (16)$$

경계조건은 앞에서의 (9-1), (9-2), (9-3)식과 동일하다.

도랑의 aspect ratio가 2인 경우에 대하여 벽면의 경사각(도랑이 수직인 일반적인 경우에 경사각은  $90^\circ$ 임)을 변화시킴에 따라 WTR이 변하는 결과를 정리한 것이 Fig. 7이다. 여기서 보면 Knudsen 확산 모델의 경우에는 경사각이  $87^\circ$  이하일 때, 가시각 모델의 경우에는 경사각이  $50^\circ$  이하일 때에 각각 WTR이 1보다 커져서 충딕힘이 우수한 박막을 얻을 수 있다. 도랑의 벽면에 경사가 생기면 소자의 집적도가 떨어지지만 이 연구의 결과에서와 같이 경사각의 작은 변화로 충딕힘이 크게 개선된다면 실제의 공정에서 응용할 수가 있을 것이다.

## 5. 결 론

미세 선폭의 도랑(trench) 또는 구멍(hole)내에 박막을 화학증착시킬 때의 충딕힘에 관한 전산 모사는 두 가지의 기초 모델(즉, 가시각 모델과 Knudsen 확산 모델)을 적절히 배합하여 수행할 수 있다. 이 연구에서는 이 방법을 텅스텐의 화학증착공정에 대하여 적용하였는데, 그 결과로부터 얻은 몇 가지 결론은 다음과 같다.

(1) 도랑(trench)의 AR(Aspect Ratio)가 클수록 충딕힘은 급격하게 불량해진다. 전산 모사 결과에 의하면 AR이 4 이상일 때에 WTR(Wall Thinning Ratio)는 0.6 이하로서 충딕힘이 매우 나쁜 박막이 얻어진다.

(2) 텅스텐 화학증착의 반응조건에서  $H_2/WF_6$ 비를 낮추거나 반응압력 및 반응온도를 높이면 충딕힘이 크게 개선된다. 따라서 실제의 공정에서는 이들 조건을 최적화함으로써 충딕힘이 우수하고 박막 증착속도도 비

교적 빠르게 조절할 수가 있다.

(3) 도랑의 벽면에 경사를 주었을 때 증착률은 매우 향상되었다. AR이 2인 도랑에 대한 결과를 보면 Knudsen 확산 모델에서는  $87^\circ$  이하, 가시각 모델에서는  $50^\circ$  이하의 경사각을 가질 때에 도랑내에 빈 공간(void)이 없는 우수한 텅스텐 박막이 얻어진다.

앞에서도 지적한 바와 같이 이 연구에서 제시한 두 가지의 기초 모델은 텅스텐 박막뿐만이 아니라 다른 박막의 화학증착에 대하여도 적용할 수가 있는데, 특히 저압화학증착공정에서 반응물의 평균자유행로가 도랑의 선평보다도 훨씬 큰 경우에 형성되는 박막의 증착률 정도를 예측하기 위하여 유용하게 사용할 수 있다.

## REFERENCES

- Green, M. L. and Levy, R. A.: *J. Metals*, **37**(6), 63 (1985).
- McConica, C. M. and Sean Churchill: "Tungsten and Other Refractory Metals for VLSI Applications III", Wells, V. A., Ed., Material Research Soc., Pennsylvania, 257(1987).
- Wilson, R. H.: "Tungsten and Other Refractory Metals for VLSI Applications III", Wells, V. A., Ed., Material Research Soc., Pennsylvania, 669(1988).
- Sze, S. M.: "VLSI Technology(2nd ed.)", McGraw-Hill, New York, p. 457(1988).
- Sze, S. M.: "VLSI Technology(1st ed.)", McGraw-Hill, New York, p. 429(1983).
- Neureuther, A. R., Ting, C. H. and Liu, C. Y.: *IEEE Trans. Elect. Devices*, ED-27, 1449(1980).
- Oldham, W. G., Neureuther, A. R., Sung, C., Reynolds, J. L. and Nandgaonkar, S. N.: *IEEE Trans. Elect. Dev.*, ED-27, 1455(1980).
- Inamdar, A. S. and McConica, C. M.: "Tungsten and Other Refractory Metals for VLSI Applications IV", Broadbent, E. K., Ed., Material Research Soc., Pittsburgh, PA, p. 197(1989).
- Bubowwiecki, V., Ledys, JI., van der Hove, L., Heyns, M. and de Santi, G.: "A CVD Tungsten Gate Technology", Proceedings of the Tenth International Conference on Chemical Vapor Deposition, Cullen, G. W. and Blocher, J. M., Eds., The Electrochemical Society, p. 661(1987).
- Blewer, R. S.: *Solid State Technol.*, **29**(11), 117 (1986).
- Krisht, M. H. and Raymond, L. S.: "Tungsten and Other Refractory Metals for VLSI Applications I", Blewer, R. S., Ed., Material Research Soc., Pittsburgh, PA, p. 313(1986).
- McConica, C. M.: "Tungsten and Other Refractory Metals for VLSI Applications II", Broadbent, E. K., Ed., Material Research Soc., Pittsburgh, PA, p. 51 (1987).
- Itoh, H.: "Tungsten and Other Refractory Metals for VLSI Applications I", Blewer, R. S., Ed., Material Research Soc., Pittsburgh, PA, p. 26(1986).
- McConica, C. M.: *J. Electrochem. Soc.*, **133**(12), 2542 (1986).
- Bryant, W. A.: *J. Electrochem. Soc.*, **125**, 1534(1978).
- Broadbent, E. K. and Ramiller, C. L.: *J. Electrochem. Soc.*, **131**(6), 1427(1984).
- Pauleau, P., Lami, Ph., Minghetti, B. and Tissier, A.: "Tungsten and Other Refractory Metals for VLSI Applications I", Blewer, R. S., Ed., Material Research Soc., Pittsburgh, PA, p. 135(1986).
- van der Putte, P.: "Tungsten and Other Refractory Metals for VLSI Applications II", Broadbent, E. K., Ed., Material Research Soc., Pittsburgh, PA, p. 77 (1987).
- McConica, C. M. and Cooper, K. J.: "Tungsten and Other Refractory Metals for VLSI Applications I", Blewer, R. S., Ed., Material Research Soc., Pittsburgh, PA, p. 197(1986).