

3차원 이온 주입 시뮬레이터 개발에 관한 연구

A Study of Three Dimensional Ion Implantation Simulator

송재복*, 원태영

인하대학교 공과대학 전자재료공학과 반도체 및 박막 기술 연구소
인천광역시 남구 용현동 253번지

Tel: 032-860-7436, Fax: 032-862-1350, E-mail: songjb@hseil.emde.inha.ac.kr

Jaebok Song*, Taeyoung Won

Inha Research Institute of Semiconductor and Thin film Technology,
Dept. of Electronic Materials and Devices Engineering, Inha University
253 Younghyun-Dong, Nam-Gu, Incheon

Tel: 032-860-7436, Fax: 032-862-1350, E-mail: songjb@hseil.emde.inha.ac.kr

요 약

We developed three dimensional Monte carlo ion implantation simulator which simulate distributions of impurities under the ion implantation on the tilted multi-layered layer. Our simulation reveals three dimensional shadow effect and sidewall scattering effect due to the geometrical shapes. For the evaluation of the developed three dimensional Monte carlo ion implantation simulator, calculations with 100,000 ions have been performed for the island and hole structures with a thin oxide of 100 Å and nitride of 2000 Å. The simulation results showed that the distribution of ion decreases near the conner of the hole structure covered with a nitride layer and increases near the conner for the island structure open to oxide. Moreover, three dimensional distributions of ions were obtained with varying incident energy, tilt and rotation angle, mask depth and three-dimensional structure geometry.

I. 서 론

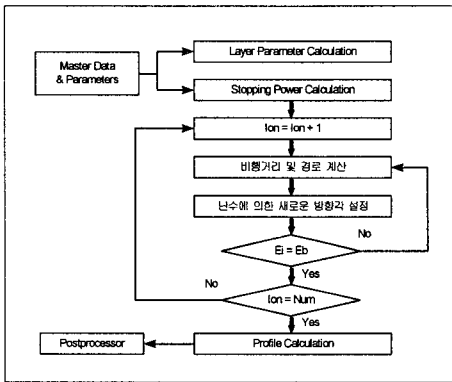
소자의 크기가 서브 마이크론 이하로 감소함에 따라, 이온 주입된 도펀트의 3차원적 분포에 대한 정확한 예측 및 제어는 소자의 설계 및 제작 상 매우

중요한 요소가 되었다. 따라서, 이러한 이온 분포를 3차원적으로 정확히 예측하기 위하여 이온 주입 시뮬레이터는 마스크의 형상 및 이온 주입 방향에 따른 shadow 효과 및 측면 산란 등의 효과를 고려하여 계산되어야 하며[1], 입사되는 경사각 및 회전각에 따라 접합 깊이 및 이온 분포의 형태가 달라지므로 3차원 구조에서 이온의 입사각에 따른 분포의 변화가 고려되어야 한다[2]. 또한, R-LOCOS 및 STI 등의 소자 격리를 위한 여러 변형된 방식들이 개발됨에 따라, 복잡한 3차원 구조에서의 이온 주입 시뮬레이션을 위하여는 질화막 및 산화막 등의 다층 레이어가 도포된 실리콘 기판의 3차원 구조에 대한 계산이 가능하여야 하며, 연계적인 공정 시뮬레이션을 위하여는 화합물 레이어에 대한 계산도 이루어져야 한다[3,4]. 시뮬레이션 결과를 3차원적으로 그래픽 출력할 수 있는 메쉬의 형성은 필수적이다[5].

제작된 3차원 몬테카를로 이온 주입 시뮬레이터는 이온 주입 에너지, 입사되는 이온의 종류, 이온 주입량, 이온의 입사각과 회전각, 타겟 레이어의 종류 및 조합, 타겟 레이어의 두께와 면적, 3차원 마스크 구조 등의 변수를 고려하여 이와 같은 3차원 분포를 예측할 수 있도록 개발되었다. 본 시뮬레이터는 타겟의 구조에 대한 3차원 메쉬를 형성하여 다차원적인 결과를 도출하며, 다층 구조에서의 다수 불순물의 분포를 표현한다. 또한, 각각의 레이어를 비정질(amorphous)로 간주하여 다양한 타겟 레이어를 대상으로 하였으며, 화합물(compound) 레이어에 대한 계산도 고려되었다.

II. 시뮬레이터의 구성 및 모델

본 논문에서 보고하는 3차원 몬테카를로 이온 주입 시뮬레이터의 구성은 제1도에 도시한 바와 같다. 먼저, 사용자가 메쉬 형성을 위한 초기 데이터 및 에너지, 도우즈량 등의 이온 분포 변수를 입력하면, 입력된 데이터에 의하여 각 영역에서 레이어의 변수를 계산한다. 이 때에 필요한 이온의 데이터들은 계산 속도의 향상을 위하여 라이브러리로 저장되어 있으며, 계산 시 요구되는 데이터를 호출하여 사용한다. 각 레이어에서의 변수들이 계산되면, 계산된 값을 바탕으로 각 영역에서의 정지력을 계산한다.



제1도 개발된 3차원 몬테카를로 이온 주입 시뮬레이터의 계산 순서도

계산된 정지력에 의해 영역 내에서의 이온의 비행거리 및 경로가 계산되며, 이온은 경로에 따라 이동하면서 자신의 현재 위치를 재확인한다. 이온이 정지하면, 정지된 위치에서 다시 난수에 의하여 새로운 방향각이 설정되며, 현재의 이온 에너지를 확인한다. 이온의 에너지가 각 영역에서의 구속 에너지(binding energy)와 비교하여 크면 이온은 다시 충돌을 진행하며, 작으면 이온은 정지한다. 주입된 이온의 수에 따라 이러한 과정을 반복하며, 최종 이온에 대한 계산이 끝나면 이온의 분포를 레이어에 따라 계산하게 되며, 계산된 데이터는 3차원 그래픽을 위한 루틴으로 전환된다.

다층 구조에서의 이온 주입을 모의 실험하기 위하여 먼저 각 레이어의 정지력이 계산되어야 한다. 레이어를 구성하는 각 원자의 몰 비(mole fraction)를 계산한 뒤, 계산된 몰 비에 따라 레이어의 원자 밀도를 계산한다. 레이어 내의 각 원자에 대한 정지력이 계산되면, 각 원자의 몰 비와 전체 레이어의 원자 밀도에 대한 곱의 표현으로 원자가 레이어의 정지력에서 차지하는 비율을 찾을 수 있으며, 이러한 원자 정

지력의 합으로 각 레이어의 정지력을 계산할 수 있다. 입사된 이온은 기판 내에서 현재의 위치를 확인하고 레이어의 경계에서 이동되는 다음 레이어에서의 정지력을 도입하여 레이어 내에서의 자유 비행 거리를 재 계산한다.

마스크 또는 기판의 구조가 3차원으로 확장됨에 따라 경사 이온 주입에 의한 영향 및 기판 회전 의존성에 대한 계산이 요구된다. 입사되는 이온은 전체 타겟 면적에 대하여 균일한 간격으로 같은 입사각을 가지고 입사되며, 마스크 및 타겟의 구조에 따라 타겟 내부로 진입하는 초기 위치를 결정하여야 한다. 모서리와 구조 옆면에서의 구조적 변동에 대하여도 입사 위치의 초기값이 고려되어야 하지만, 계산의 편의를 위하여 수직면으로 가정하고 계산한다. 각 면에 입사된 이온은 임의의 난수에 의하여 내부로 입사 또는 반사되며, 측면에서 반사된 입자의 궤적에 대하여도 반사각 경로 및 에너지를 계산하여야 한다. 따라서, 타겟의 구조 및 입사되는 경사각, 회전각을 변수로 shadow 효과 및 측면 산란 효과를 고려하여 달라지는 불순물의 분포를 계산한다.

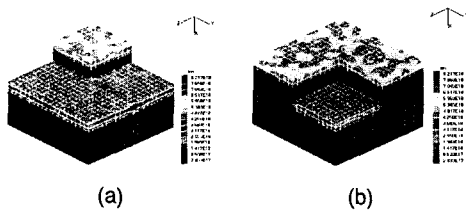
III. 시뮬레이션의 3차원 결과

1) 마스크 구조에 의한 3차원 분포

본 연구에서는 3차원 기하학적 구조에 의한 이온 분포의 의존성을 도시하고자 공구조(hole structure) 및 섬구조(island structure)에 대한 이온 주입 시뮬레이션을 수행하였다. 각각의 타겟은 $0.7\mu\text{m}$ 의 Si 기판 위에 $0.01\mu\text{m}$ 의 초기 산화막을 형성하고, $0.2\mu\text{m}$ Si_3N_4 을 마스크로 하였다. 공구조의 경우에 노출된 실리콘 기판의 범위는 $0.5 \times 0.5\mu\text{m}^2$ 으로 하였으며, 섬구조의 경우에는 같은 면적에 마스크 구조를 설정하였다. 주입된 이온의 수는 계산의 효율성을 위하여 100,000개로 설정하였으며, 입사각은 기판의 표면에 수직인 축을 기준으로 설정하였다. 초기 회전각은 y 축을 기준으로 시계 방향을 (+), 반시계 방향을 (-)로 설정하여 이온의 분포를 표현하였다.

제2도는 공구조 및 섬구조에 대한 시뮬레이션의 결과를 도시하고 있다. (a) 및 (b)도 각각 20keV의 에너지에 대하여 $1.0 \times 10^{14}\text{cm}^{-2}$ 의 도우즈량으로 boron을 주입시킨 결과이다. 제2(a)도는 섬구조에 대하여 수직 입사하였을 때의 이온의 분포를 도시하고 있다. 그림에서 보이는 바와 같이, 섬구조의 3차원 코너 부근에서 이온의 농도가 마스크의 양 측면에서 보이는 이온의 농도보다 증가되어 있음을 볼 수 있다. 또한, 제2(b)도는 공구조에 대하여 7° tilt 및 -135° rotation

시켜 입사하였을 때의 이온의 분포를 도시하고 있다. 3차원 맵 상에서의 이온의 분포를 가시적으로 도시하기 위하여 경사 입사하였으며, 시뮬레이션 결과 코너 부근에서 이온의 농도가 마스크 양 측면 부근에서의 농도에 비하여 감소되어 있음을 볼 수 있다. 이와 같은 이온 분포를 형성하는 원인은 입사되는 이온이 마스크의 측면 구조와 산란하여, 각각의 코너 부근에서 단위 면적 당 입사되는 이온의 수가 섬구조의 경우에는 증가하고, 공구조의 경우에는 감소하기 때문이다. 이와 같은 현상은 기판의 노출 면적이 작아짐에 따라 더욱 더 뚜렷이 나타난다. 최대 등농도 준위는 $6.19 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ 으로 계산되었으며, 노출된 실리콘 기판의 중심부에서 계산된 1차원 접합 깊이는 수직 입사의 경우 약 658 Å, 경사각이 10° 인 경우에는 약 649 Å로 계산되었다.

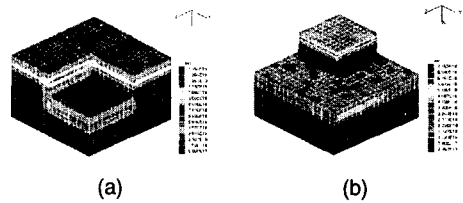


제2도 (a) boron을 20keV으로 0° tilt 및 0° rotation 시켜 주입한 결과
(b) boron을 20keV으로 10° tilt 및 -135° rotation 시켜 주입한 결과

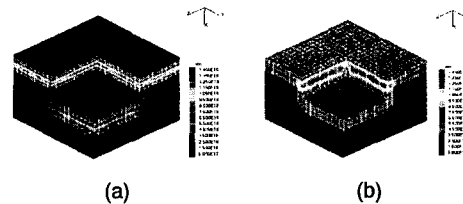
2) 마스크 및 경사각과 초기 회전각 의존성

마스크의 및 입사 시의 경사각과 초기 회전각에 대한 의존성을 제3도에 도시하였다. 제3(a)도는 공구조의 Si 타겟에 boron을 $1.0 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$ 의 도우즈량, 50keV의 주입 에너지로 30° tilt 및 10° rotation 시켜 입사시킨 결과를 도시하고 있으며, 제3(b)도는 섬구조의 Si 타겟에 boron을 $1.0 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$ 의 도우즈량, 30keV의 주입 에너지로 30° tilt 및 -170° rotation 시켰을 때의 이온의 분포를 보이고 있다. 이온의 분포는 입사 시의 경사각과 초기 회전각에 의존적이며, 마스크의 구조 및 두께에 따라 그 분포가 달라진다. 제3(a)에서 이온은 y축을 기준으로 10° 회전되어 30° 의 경사각으로 입사되었으므로, 기판 상의 이온 분포가 z축 방향보다 y축 방향을 따라 넓게 분포되어 있음을 알 수 있다. 또한, z축 상의 마스크의 측면에도 다수의 이온이 분포하게 되며, 노출된 기판에도 모서리를 따라 이온의 분포가 나타남을 볼 수 있다. 이는 입사 방향에 따라 마스크의 측면에 입사되는 이온의 분포로 이해되며, 또한 마스크 측면에서의 측면 산란 효과에 의하여 기판으로 재 입사되는 이온의 분포에 기인

한다. 제3(b)도에서는 섬구조에서의 경사각 및 회전각에 따른 이온의 분포를 보여주고 있다. 이온의 입사각 및 마스크의 두께에 따른 shadow 효과에 의하여 이온은 그림에서와 같은 분포를 보인다. shadow 현상으로 인하여 모서리 부근의 기판에서의 이온의 분포는 감소하게 되며, 이는 초기 회전각의 결정에 따라 비대칭적인 분포를 형성한다. 제3(b)도에서는 z축을 포함하는 모서리의 이온 분포가 y축을 포함하는 모서리에 대하여 적은 양을 보임을 알 수 있다. shadow 효과에 의한 이온 분포의 감소는 마스크의 두께가 커짐에 따라 심각하게 드러나며, 트렌치 구조에서는 측면 산란 효과와 더불어 복잡한 양상의 분포를 보이게 된다.



제3도 (a) boron을 50keV으로 30° tilt 및 10° rotation 시켜 주입한 결과
(b) boron을 30keV으로 30° tilt 및 -170° rotation 시켜 주입한 결과



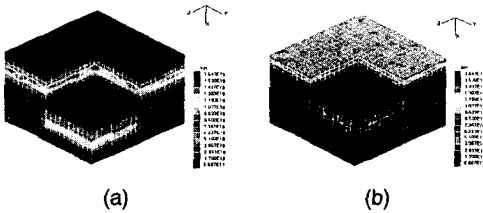
제4도 (a) boron을 50keV으로 0° tilt 및 0° rotation 시켜 주입한 결과
(b) boron을 50keV으로 45° tilt 및 45° rotation 시켜 주입한 결과

제4도는 이온의 경사각에 따른 1차원 접합 깊이의 변화를 도시하고 있다. 공구조의 Si 타겟에 boron을 50keV의 주입 에너지 및 $1.0 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ 의 도우즈량으로 입사한 결과이다. 제4(a)도는 수직 입사시킨 결과를 도시하고 있으며, 제4(b)도는 45° tilt 및 45° rotation 시켰을 때의 이온의 분포를 보이고 있다. 두 그림에서 비교되는 바와 같이, 경사각이 커짐에 따라 이온의 수직 분포 편차는 작아지며, 더불어 접합 깊이 역시 감소됨을 알 수 있다. 따라서, 주입 에너지 뿐 아니라 경사각의 조절을 통하여 필요한 형상의 junction의 형성이 가능함을 알 수 있다. (a) 및 (b)의

시뮬레이션 결과, 각각 1565 Å과 1181 Å의 접합 깊이를 도출하였으며, 최대 등농도 준위는 $7.93 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ 과 $9.57 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ 으로 계산되었다.

3) 불순물에 대한 의존성

제5도에 입사되는 이온의 종류에 따른 분포의 변화를 도사하였다. 제5(a)도는 공구조의 Si 타겟에 80 keV의 주입 에너지 및 $1.0 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$ 의 도우즈량으로 boron을 수직 입사시킨 결과를 도사하고 있으며, 제5(b)도는 phosphorus를 수직 입사 시켰을 때의 이온 분포를 보이고 있다. 이러한 분포의 변화는 각 입사 이온의 원자 질량과 관련하며, 질량이 무거운 이온일수록 타겟 내에서 이온의 수직 분포 편차가 작아지며, 접합 깊이 또한 감소되는 것을 볼 수 있다. boron이 수직 입사되었을 때와 phosphorus를 수직 입사한 결과 계산된 접합 깊이는 각각 2494 Å과 1014 Å으로 계산되었다.



제5도 (a) 80keV의 boron을 수직 입사한 결과
(b) 80keV의 phosphorus를 수직 입사한 결과

IV. 결론

본 연구에서는 3차원 몬테카를로 이온 주입기를 개발하였고, 이를 바탕으로 boron 및 phosphorus 등 다양한 도펀트에 대한 3차원 분포를 예측하였다. 다층 레이어에 대한 이온의 분포가 계산되었으며, 마스크 및 기판의 3차원 구조에서 이온의 입사각에 대한 의존성 및 마스크의 두께에 따른 shadow 효과, 측면 산란 효과가 고려된 이온 분포를 예측하였다. 3차원 구조의 형성을 위한 메쉬를 생성하였으며, 이를 토대로 3차원적인 이온 분포를 가시적으로 제시하였다. 시뮬레이션의 결과, 공구조의 경우에는 3차원 코너 부근에서의 이온의 분포가 감소하며, 섬구조의 경우에는 코너 부근에서의 이온의 분포가 증가함을 볼 수 있다. 이는 코너 부근에 입사되는 이온의 단위 면적 당 수의 증감에 따른 영향으로 사료된다. 또한, shallow junction을 형성하기 위하여 주입 에너지의 감소 외에 이온의 입사각을 증가시킬 경우, 마스크의 높이 및 구조에 따라 이온의 분포가 형성되며 tilt 및 rotation angle에 따라 이온의 분포가 달라짐을 알 수 있었다.

이온의 분포는 입사되는 이온의 tilt 및 rotation angle을 기준 축으로 하여 분포의 대칭을 이루며, 전체적인 분포는 tilt 된 방향으로 치우치게 된다. 이와 더불어 3차원 구조에 따라 shadow 효과 및 측면 산란 등의 영향으로 그 분포를 달리 한다. 마스크 측면에서의 측면 산란 효과에 의하여 기판으로 재입사되어 노출된 기판의 모서리를 따라 이온의 분포가 나타남을 볼 수 있었다. 또한, shadow 현상으로 인하여 모서리 부근의 기판에서의 이온의 분포는 감소하게 되며, 이는 초기 회전각의 결정에 따라 비대칭적인 분포를 형성한다. 소자의 집적도가 증가함에 따라 중요시되고 있는 입사각 및 마스크 구조의 의존성을 3차원적으로 예측하였다. 이러한 이온 분포의 예측은 이온 주입 후 Drive-in 확산 초기의 이상 분포 현상 및 고집적 소자의 제작을 위한 RTA 공정 상의 확산 분포 제어 등의 문제 해결 뿐 아니라 초고집적 소자의 설계 조건 및 공정 조건 확립을 위한 중요한 관건이 될 것으로 사료된다.

본 과제는 시스템 공학 연구소의 CRAY R&D 사업, 정보 통신 연구 관리단의 대학 기초 연구 지원 사업, 한국 과학 재단의 산학 협동 연구 사업의 지원으로 수행되었다.

참고 문헌

- [1] L. Gong, J. Lorenz, and H. Ryssel, Proceedings of the 20th European Solid State Device Research Conference(ESSDERC), pp. 93-96, 1990.
- [2] J. Lorenz, and R.J. Wierzbicki, 1993 International Workshop on VLSI Process and Device Modeling(1993 VPAD), pp. 84-85, 1993.
- [3] C. Park, K.M. Klein, A.F. Tasch, R.B. Simonton, and S. Novak, Proceedings of the 7th International Conference on the Numerical Analysis of Semiconductor Devices and Integrated Circuits(NASECODE), pp. 87-88, 1991.
- [4] G. Hobler, S. Selberherr, IEEE Trans.CAD, vol. 8, no.5, pp. 450-459, May 1989.
- [5] J. Lorenz, K. Tietzel, A. Bourenkov, and H. Ryssel, 1996 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices(SISPAD'96), pp. 23-24, 1996.
- [6] H. Stippel, S. Halama, G. Hobler, K. Wimmer, and S. Selberherr, Workshop on Numerical Modeling of Processes and Devices for Integrated Circuits(NUPAD), pp. 231-236, 1992.