

연속 이온 주입 공정 모델링 및 시뮬레이션

손 명식, 박 수현, 황 호정

중앙대학교 전자공학과 반도체 공정 소자 연구실

156-756 서울시 동작구 흑석동 221

E-mail 주소 : sms@semilab3.ee.cau.ac.kr

Modeling and Simulation of Multiple Implantation Process

Myung-Sik Son, Su-Hyun Park, and Ho-Jung Hwang

Semiconductor Process and Device Lab., Dept. of Electronic Engineering,

Chung-Ang Univ., Seoul, 156-756, KOREA

E-mail: sms@semilab3.ee.cau.ac.kr

Abstract - We previously developed and presented the 3D ion implantation simulation code, TRICSI. In this paper, we performed the multiple implants into (100) silicon substrate with our recently enhanced version. Our results for the multiple implants were compared with the previously published SIMS data and obtained the good agreements. In this paper the channeling behaviour of implanted impurity and the damage accumulation are analyzed and discussed in the simple 3D structure, named the Hole structure which has a rectangular implant window.

I. 서론

반도체 소자 기술에 널리 쓰이고 있는 연속 이온 주입 공정에 있어서 초기에 주입되는 이온의 정확한 결함 발생 분포는 후속 주입되는 이온의 정확한 불순물 분포를 얻기 위해서 필수적으로 예측되어야 한다. 또한, 채널링과 TED 효과 예방을 위한 Si 또는 Ge 이온 주입에 의한 선 비정질화 공정은 초미세 접합 형성을 위한 중요한 기술중 하나이다. 예를 들어, 같은 입사 범위에서의 As-B 연속 주입은 B과 As의 확산성과 단채널(short channel) MOS 소자에 Hot-Carrier의 생성 억제라는 장점으로 인해 사용된다.[1] 그러므로, 이러한 기술을 정확히 예측할 수 있는 능력은 반도체 산업에서 매우 중요하다.

본 논문에서는 최근에 크게 개선된 TRICSI 코드를 이용하여 연속 이온 주입 공정을 수행하였고, 이를 통해 불순물 분포 및 결함 분포를 분석하였다.

효율적이고 정확한 물리적 토대의 일관성 있는 이온 주입 공정 모델링을 위하여 이온 주입된 이온의 궤적 및 반동된 실리콘 원자의 궤적을 모두 추적하고 이때 발생하는 결함과 틸새 정보를 이용하여 통계적 확률을 통해 점결함의 누적으로 인한 디채널링 과정과 상온 이온 주입시의 결함 재결합을 모델링 하였다. 이전 버전은 점결함 및 클러스터링, 비정질층의 형성들을 간단한 확률을 통하여 모델링 하였다.[2] 그러나, 최근 MDS (Molecular Dynamics Simulation) 결과는 가벼운 B인 경우에도 국부적인 비정질 영역(amorphous pockets)을 형성하는 것을 보여 주고 있으며, 또한, 이러한 국부 비정질 영역은 간단한 점결함의 누적만으로는 정확한 불순물 분포를 예측할 수 없다는 것을 보여 주고 있다. [3-4] 이러한 국부 비정질 영역은 이온 주입되는 이온 질량 및 에너지, 그리고 도즈량에 따라 증가하며, 결함 재결합 과정에 의해서도 완전히 소멸되지 않는 것으로 알려져 있다. 따라서, 이러한 국부 비정질 영역의 형성 및 국부 비정질 영역을 모델링 하기 위하여 아래 (1)식과 같은 형태의 디채널링 함수를 도입하였다.[5]

$$f_d = k_d \cdot (1 - e^{-P_d}) \quad (1)$$

여기서, k_d 는 디채널링 계수이며, P_d 는 국부 영역의 비정질화 퍼센트이다.

국부 비정질 영역을 만날 확률 P_a 는 (2)식으로 표현되며 하나의 틸새 원자를 만날 확률 P_i 은 (3)식으로 표현하였다.

$$P_a = k_a \cdot f_d \quad (2)$$

$$P_i = (1 - k_a) \cdot f_d \quad (3)$$

II. TRICSI 코드의 결함 모델링

여기서, k_a 는 이온 질량 의존성 계수이며, 이온 질량이 높을수록 큰 상수 값으로 결정된다.

물리적으로 일관성을 유지하기 위해 B 이온 주입을 제외하고는 k_d 계수 값을 0.68로 고정시켰다. B 인 경우는 비교적 적은 결함을 생성하므로 0.25의 작은 k_a 값을 사용하였다. 따라서, 이번 모델은 주입되는 이온 질량에 의해 생성되는 비정질 국부 영역을 비교적 최근의 실험 및 연구 결과와 일치하는 결함 분포를 얻을 수 있다.

또한, 이전에 개발된 모델에서의 재결합 확률 함수는 단순히 농도에 의존하는 1차 선형 함수였으나 결함 재결합 과정은 비선형적인 과정으로서 단순한 1차함수로서는 설명하기가 어렵다. 국부 비정질 영역을 포함시키는 경우 결함 재결합 과정이 이러한 국부 비정질 영역의 영향을 받아 도즈가 증가하면 국부 비정질 영역의 영향으로 접결함 재결합률이 감소할 것으로 예상된다. 이러한 고찰은 최근의 S. Tian의 결과와 일치하며, 이를 비선형 함수를 도입하여 모델링 하였다.[6]

B, BF₂, P, Si 그리고 As의 이온 주입결과를 SIMS 측정치와 비교하여 그림 1(a)~(d)에 나타내었다. 비교적 이온 주입 공정 조건 의존성을 잘 예측함을 보여 주고 있다. 각 이온에 대한 디체널링 계수값을 표 1.에 나타내었다.

표 1. TRICSI 결함 모델에서 사용된 계수

이온 계수	P	Si	As	B	BF ₂
k_d	0.68	0.68	0.68	0.68	0.68
k_a	0.48	0.48	0.55	0.25	0.5

III. 연속 이온 주입 공정 모델링

이러한 결함 모델링을 토대로 연속 이온 주입 공정 시뮬레이션을 수행하였다. 이러한 격자 손상 모델링은 연속 이온 주입 공정에 있어서 신뢰성 있는 불순물 분포를 예측하기 위해서는 필수적인 과정이다.

초기 이온이 만들어 낸 결함 분포는 다음 이온 주입 과정의 초기 결함 정보로 제공되기 위하여 파일로 저장하였다. 다음 공정이 어닐링 공정인 경우 최근 MDS 결과에 의하면 600°C 이하의 짧은 어닐링 과정에서는 결함이 완전히 복구되지 않는 상태로 존재하게 되므로 이러한 어닐링 공정을 거친다면 감소 계수를 초기에 줄 수 있도록 모델링 되어 있다. 그렇지 않은 경우에는 그대로 초기 결함 분포가 된다. 따라서, 총 비정질화율은 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$P_d^{total} = f_r \cdot P_{di} + P_d \quad (4)$$

여기서, P_{di} 는 초기 이온이 발생시킨 결함이다. f_r 은 어닐링 공정에서의 감소 계수(reduction parameter)이다. 충분히 어닐링되어 격자 손상이 완전 복원되었다면 f_r

은 0으로 설정될 수 있고, 어닐링 과정이 없었다면 1이 된다. 이러한 초기 이온 주입 공정에서 발생한 결함은 다음 이온 주입 공정에서 디체널링 과정을 심화시켜 이온 체널링을 억제시키게 된다. 이러한 결과를 그림 2와 3.에 나타내었으며, 초기 이온의 도즈량 변화에 따른 이온 분포 실험 결과와 비교하였다.

IV. 시뮬레이션 결과 및 분석

그림 1.에서는 TRICSI 코드의 신뢰성을 확보하기 위하여 최근의 모델링을 통한 결과와 SIMS 측정치와 비교하여 나타내었다.[7-8] 이번 버전에서는 전자 저지력 모델을 새로이 제한한 경험식을 사용하였으며, 각 이온에 따른 결함 형성 및 분포를 새로이 모델링 하였다.[6]

그림 2.에서는 As 25 keV 이온을 먼저 이온 주입한 후 B를 35 keV 이온 주입한 결과를 나타내었다. As 도즈 변화량에 따른 B 농도 변화를 SIMS 측정치와 비교하여 나타내었다. As를 25 keV, 도즈 $5 \times 10^{14}/\text{cm}^2$ 이온 주입하였을 때 비정질 층이 대략 380Å 발생하였다. 그림에서는 100% 비정질화된 결함 분포의 수평한 직선으로 표현되었다. 이러한 비정질층의 형성은 뒤이어 들어온 B 이온의 디체널링을 심화시켜 더 얇은 접합을 형성시키게 된다. 시뮬레이션 결과와 SIMS 측정치가 비교적 잘 일치함을 확인하였다. As-B 이온 주입후의 1차원 결함 분포는 선 이온 주입된 분포에 후 이온 주입된 양이 더해진 형태를 나타내었으며, As 도즈 $5 \times 10^{14}/\text{cm}^2$ 인 경우에는 비정질층을 대략 100Å 증가시켰다.

다음은 간단한 공구조에서 측면 불순물 분포 변화를 보기 위하여 그림 2의 As 도즈 $5 \times 10^{14}/\text{cm}^2$ 을 선 이온 주입한 경우에 대해 B 이온 분포의 측면 변화와 최종 접결함 생성 분포를 보기 위하여 1/2 절단한 단면의 표면 농도 변화로 그림 3.에 나타내었다. 정사각형 윈도우 크기는 $543 \times 543 \text{ \AA}^2$ 이었으며, 보여진 시뮬레이션 체적은 $1086 \times 1086 \times 5973 \text{ \AA}^3$ 이다. 매쉬 간격은 각 축에 등 간격으로 108.6 Å 으로 설정되었다.

그림 3(a).는 선 이온 주입 공정이 없었을 때의 붕소 이온 분포도이다. 여기서 각 색상은 각 지점의 표면 농도를 나타낸다. 가벼운 붕소 이온은 깊이 방향으로의 체널링과 함께 작은 윈도우 크기에 비해 측면 분포가 넓게 형성됨을 알 수 있다.

그림 3(b).에서는 As 도즈 $5 \times 10^{14}/\text{cm}^2$ 로 선 이온 주입한 후 뒤이어 B를 이온 주입한 후의 B 농도 분포이다. 측면 변화를 잘 나타내기 위하여 이온 주입 윈도우의 그림에서 알 수 있듯이 도즈가 증가하면 결함양이 증가하여 뒤 이어 들어오는 이온은 디체널링되어 깊이 방향 분포는 작아지지만 상대적으로 측면 분포가 커짐을 알 수 있다.

그림 3(c).에서는 As-B 이온 주입 후 최종 생성된 결함 농도 분포를 나타내었다. 여기서 비정질 층은 하얀색 원으로 표시되었다. 에너지가 비교적 작은 경우 결함 분포는 이온 분포와 거의 비슷함을 확인하였다. 이는 핵전이 에너지가 작은 경우에는 발생한 곳 주변에 틱새가 존재함을 의미한다. 시뮬레이션에서는 적은 도즈 량과

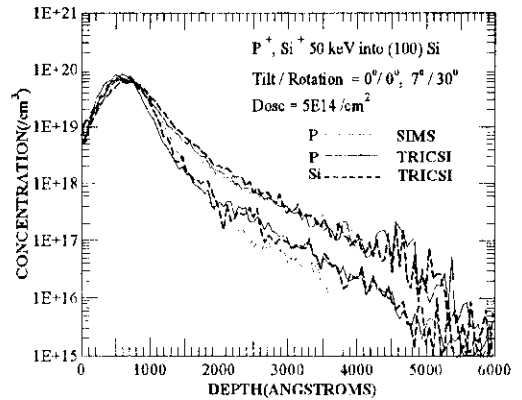
함께 가벼운 붕소 이온인 경우 결합의 양이 크지 않기 때문에 그림 2(b)에 보인 바와 같이 거의 As 결합 분포와 비슷한 분포를 이루면서 증가시켜 놓았음을 알 수 있다.

V. 결론

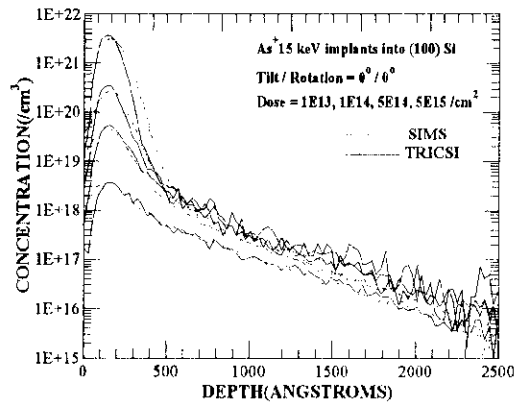
3차원 이온 주입 시뮬레이터인 TRICSI 코드를 이용하여 연속 이온 주입 공정을 시뮬레이션하고, 1차원 SIMS 결과와 비교하여 시뮬레이터의 신뢰성을 확보하였다. 초기에 입사된 이온 도즈량이 증가하면 발생한 점결합의 증가 및 비정질 영역의 증가로 뒤이어 들어오는 이온은 채널링이 감소되어 억제됨을 3차원 적으로 확인 분석하였다.

참고 문헌

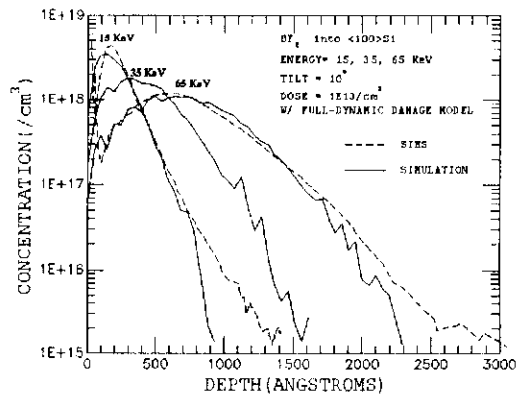
- [1] K. Yokota, Y. Okamoto, F. Miyashita, T. Hirao, M. Watanabe, K. Sekine, Y. Ando, and K. Matsuda. "Dual arsenic and boron ion implantation in silicon," *J. Appl. Phys.* vol. 75, pp. 7247-7251, June 1994.
- [2] 손명식, 황호정, "Three-Dimensional Monte Carlo Modeling and Simulation of Point Defect Generation and Recombination During Ion Implantation," *전자공학회 논문지*, Vol. 34-D, No. 5. pp. 32-44, May 1997.
- [3] T.Diaz de la Rubia and G.H.Gilmer, "Structural Transformation and Defect Production in Ion Implanted Silicon: A Molecular Dynamics simulation Study," *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 74, No. 13, pp. 2507-2510, 1995.
- [4] M.-J. Caturla, T.Diaz de la Rubia, L. A. Marques and G.H. Gilmer, "Ion-beam processing of silicon at keV energies: A molecular-dynamics study," *Phys. Rev. B.*, Vol. 54, No. 23, pp. 16683-16695, 1996.
- [5] M. Posselt, B. Schmidt, C. S. Murthy, T. Feudal, and K. Suzuki, "Modeling of Damage Accumulation during Ion Implantation into Single-Crystalline Silicon," *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 144, No.4, pp. 1495-1504, 1997.
- [6] 손명식, 황호정, "Three-Dimensional Monte Carlo Modeling and Simulation of Ion Implantation Process: Phosphorus and Silicon Self Implants over Commonly used Energy and Dose Range," *전자공학회 논문지* 심사중, 1998.
- [7] S. Tian, *Monte Carlo simulation of ion implantation damage process in silicon: arsenic, phosphorus, silicon, BF₂, and Boron implants*, Ph. D. Thesis, The University of Texas at Austin, 1997.
- [8] G. Wang, *Computationally Efficient Models for Monte Carlo Ion Implantation Simulation in silicon*, Master's Thesis, The University of Texas at Austin, 1997.



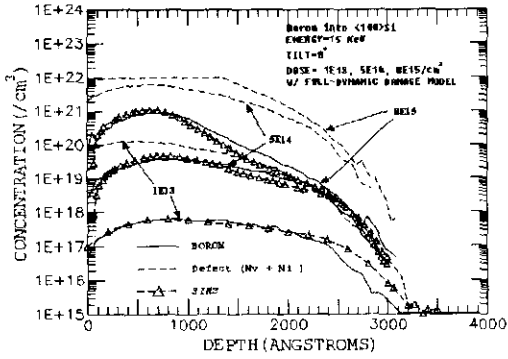
(a) Phosphorus와 Silicon 이온 주입 결과와 SIMS 비교



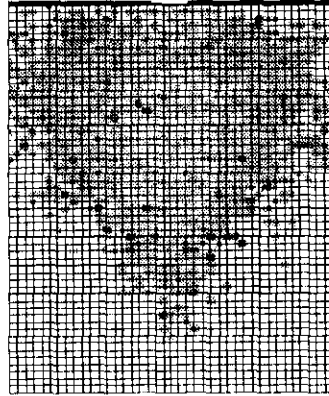
(b) Arsenic 이온 주입 결과와 SIMS 비교



(c) BF₂ 분자 이온 주입 결과와 SIMS 비교

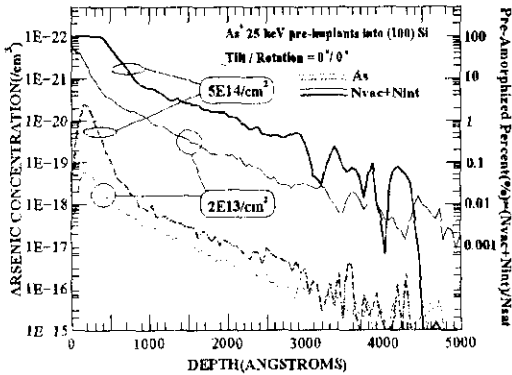


(d) Boron 이온 주입 결과와 SIMS 비교

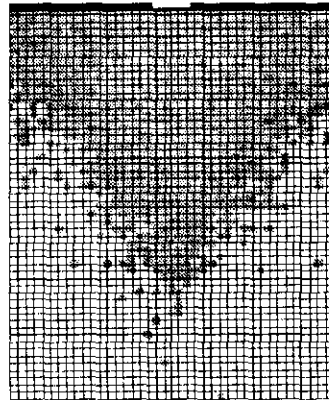


(a) As 선 이온 주입이 없었을 때의 B 농도 분포

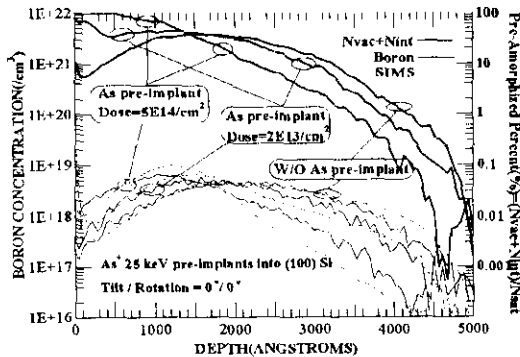
그림 1. B, As, P, Si 및 BF₂ 분자 이온 주입 시뮬레이션 결과와 SIMS 측정[7-8] 비교



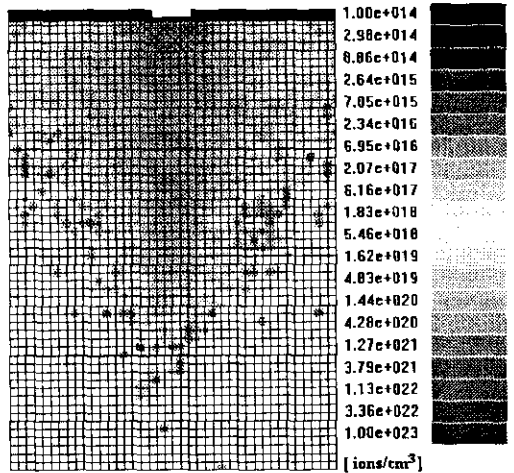
(a) As 25 keV 이온 주입후의 초기 결함 생성 분포



(b) As 선 이온 주입 후의 B 농도 분포



(b) As 선 이온 주입한 후 B 이온주입한 후의 농도 및 생성 결함 분포 변화



(c) As-B 연속 이온 주입후의 최종 생성 결함 분포와 농도 색상표

그림 2. As 25 keV를 선 이온 주입한 후, B 35 keV를 연속 이온 주입한 결과와 SIMS 측정[7-8] 비교

그림 3. As 25 keV, 도즈 $5 \times 10^{14}/\text{cm}^2$ 를 선 이온 주입한 후, B 35 keV, 도즈 $1 \times 10^{14}/\text{cm}^2$ 를 이온 주입한 불순물 및 연속 이온 주입 후 최종 생성 결함 분포도.