

論文93-30A-12-6

해석모델을 이용한 3차원 이온주입 시뮬레이터 개발

(Development of Three-Dimensional Ion Implantation Simulator Using Analytical Model)

朴和植*, 李俊賀*, 黃好正*

(Hwa Sik Park, Jun Ha Lee and Ho Jung Hwang)

要約

실리콘기판을 목표물로서는 이온주입공정을 위한 3차원 시뮬레이터를 개발하였다. 시뮬레이터에 구현된 모델은 저에너지, 복잡한 구조등의 초소형 고집적 소자개발에 필수적인 환경에 있어서 정확도, 수행속도등을 보장하는 해석모델이다. 구축된 3차원 모델에는 산란과 채널링등의 1차원 효과와 깊이에 의존하는 2차원 효과인 측면확산효과, 그리고 3차원 효과인 마스크 효과등이 고려되었다. 1차원 모델은 JPD 접근법을 이용하였고 2 차원 모델은 1차원 모델에 변형된 Gaussian 분포함수가 접목되어있는 형태이며 3차원 모델은 2 차원모델에 또 다른 형태의 변형된 Gaussian 함수가 접목되어있는 형태로 구축되었다. 해석대상인 3차원 구조는 마스크의 형태에 따라 孔構造, 線構造 및 섬構造등이 제안되었으며 각 구조별, 주입이온별 3차원 분포를 도출하였다.

Abstract

Three-dimensional simulator for the ion implantation process is developed. The simulator based on an analytical model which would be a choice with high computational efficiency and accuracy. This is an important issue for the simulation of a numerous number of processing steps required in the fabrication of ULSI or GSI. The model can explain scattering and bulk channeling mechanism (1D). It can also explain depth dependent lateral diffusion effect(2D) and mask effect(3D). The model is consist of one-dimensional JPD(Joined Pearson Distribution) function and two-dimensional modified Gaussian functions. Final implanted profiles under typical mask structures such as hole, line and island structure are obtained with varying ion species.

1. 서론

완전한 이온주입 모델링을 하기 위해서는 실리콘

벌크로 주입되는 이온과 주변 격자등과의 모든 산란 공정에 대한 표현이 필요하다. 이는 주입공정에 의해 야기되는 이온 및 원자들의 분포를 직접 결정하는 기구이기 때문이다. 이를 위해 연구되어온 방법으로 통계역학을 채용한 Monte-Carlo 시뮬레이션이나 Boltzmann 수송방정식을 푸는 경우^[1-5]를 예로 들 수 있다. 그러나 이와같은 정교한 계산과정은 복잡한

*正會員, 中央大學校 電子工學科
(Dept. of Elec. Eng., Jungang Univ.)
接受日字 : 1992年 9月 14日

구조를 주입목표로 한다던지 LDD 구조같은 얇은 접합부 형성을 위한 저에너지 이온주입에 대해서는 불충분한 것으로 알려져있다. [6] Gaussian 함수나 Pearson 함수같은 통계분포 함수를 사용하는 해석적 접근법은 ULSI 나 GSI 제조에 필요한 수 많은 공정단계를 시뮬레이션할 때 절대적으로 필요한 계산효율을 갖고있다. 그리고 실리콘 결정을 목표물로 할때 주입된 이온의 채널링 현상을 정확하게 표시할 수 있다면 해석적 접근법을 선택하는것은 당연하다.

II. 1 차원 모델과 채널링

이온주입을 위한 1 차원 모델 구축시 고려해야할 중요한 물리적 현상은 가벼운 이온주입시 발생하는 채널링 현상이다. 실리콘결근내에서 일어나는 산란현상과 반동현상(recoil)에 의한 에너지 전송, 그리고 dose rate effect 등 역시 고려되어야 할 현상들이다. 주입되는 이온의 무게가 가벼울수록 그리고 주입 에너지가 클수록 그 현상이 크게 나타나고 소자특성에 민감한 영향을 주는 현상은 채널링이다. 따라서 1 차원 모델은 주입이온의 무게, 주입에너지, DOSE 당등에 의해 주입된 이온의 최종분포 형상을 정확히 예측할 수 있도록 구축되어야 할것이다.

JPD (Joined Pearson Distribution function) 로 칭하기로한 이 모델은 9가지의 통계함수로 구성된 Pearson System [7] 에서 주입에너지, 이온 등의 공정조건에 따라 산란을 설명할 수 있는 하나의 함수와 채널링을 설명하는 또 다른 함수를 자동적으로 선택하여 주입 에너지의 함수로 표현되는 실리콘내 한점에서 서로 연결되도록 한것이다. 한편 비소와 같은 무거운 이온을 주입하는 경우나 비정질 실리콘을 주입 목표물로 하는 경우에 대해서는 채널링 현상이 상대적으로 작기 때문에 한개의 Pearson 함수를 적용하여 주입분포를 예측할 수 있다. 그러나 이 또한 Pearson 계열의 통계함수이므로 JPD 모델에서 추출 가능하다. 식 (1)이 최적의 분포함수를 추출할 수 있는 Pearson system 이다.

$$\frac{dp(y)}{dy} = -\frac{a+y}{b_0 + b_1y + b_2y^2} \tag{1}$$

여기서 p(y) 는 y 방향 즉 깊이방향으로의 분포 함수를 의미하며 a, b0, b1, b2는 분포함수를 특징지우는 상수값이다. 이 식으로부터 계수 a, b0, b1, b2 등의 형태에 따라 9 개의 분포함수가 유도 되는데 각 계수는 깊이방향으로의 주입된 이온들의 최종위치에 대한 평균치를 표시하는 평균주입거리 Rp, 평균주입

거리에 대한 표준편차 σ_p , 이온분포의 비대칭성을 나타내는 γ , 분포의 최고치부근에서의 점도 β 등의 4-모멘트에 의해 표현될 수 있다. 그리고 분포의 특성을 나타내는 Rp, σ_p , γ , β 등의 모멘트는 주입 에너지를 함수로 하는 다항식으로 표현되고 각각의 다항식에 포함된 상수들은 실험데이터에서 추출된 것이다. Dose rate effect 는 이온분포의 최고치를 결정짓기 위해 또 하나의 에너지 다항식에 결합되는 형식으로 고려되었다. 따라서 JPD 에 필요한 에너지 다항식은 두개의 분포함수를 위한 8개의 모멘트, 최고농도치, 연결점등 모두 10개가 필요하다. 본 연구에서 추출한 상수들의 실험치와의 평균오차는 0.5845%로 실험치와 잘 일치하는 분포예측이 가능함을 보였다.

그림 1. 에 붕소이온을 $5 \times 10^{14}/\text{cm}^2$ DOSE 로, 에너지변화에 따라 주입했을때 개발된 모델로 예측한 분포와 실험치와 비교하였다. 점선은 JPD 에 의한 시뮬레이션치이고 실선은 SIMS 값이다. 그림으로부터 자연적인 산화막에 의해 SIMS 형상이 급격한 증대추세를 보이는 표면영역과 이온수율이 적어 발생하는 가파른 농도기울기 영역, 그리고 분포의 꼬리부분에서 발생하는 잡음영역등을 제외한 전영역에서 실험치와 잘 맞음을 알 수 있다. 그림 2.는 비소이온을 에너지 변화에따라 변화하는 이온 분포를 보이고 있다. 무거운 이온주입에서의 접합깊이 및 최고농도치의 변화, 채널링현상의 감소등을 결과로 부터 알 수 있다.

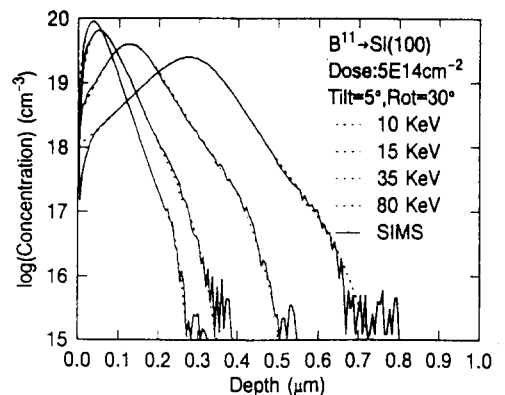


그림 1. 붕소이온 주입에 대한 1차원 분포
Fig. 1. One dimensional profile by JPD simulation (dotted line) and by SIMS (full line). Boron implanted in silicon with varying energy.

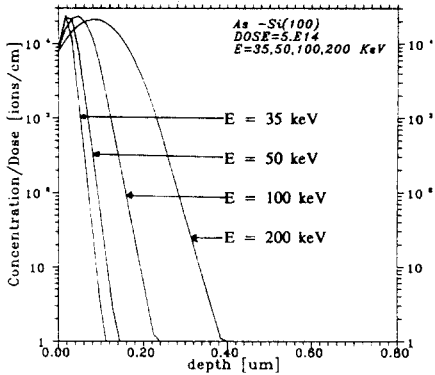


그림 2. 비소이온 주입에 대한 1차원 분포
Fig. 2. JPD simulation of an arsenic implantation with varying energy.

Ⅲ. 2차원 모델과 깊이의존성 측면 확산

본 연구에서는 변형된 Gaussian 함수를 이용하여 (2)식과 같은 형태로 표시되는 깊이방향의 의존성을 갖는 측면 분포함수를 도입한다.

$$f(x, y) = p(y) \cdot p(x, y) \tag{2}$$

이는 2 차원 분포함수 $f(x, y)$ 가 1차원 JPD 모델인 $p(y)$ 와 깊이방향 (y)에 의존하는 측면 (x) 분포함수 $p(x, y)$ 의 곱으로 나타낼 수 있음을 의미한다. 분포함수 $p(x, y)$ 는 JPD 에서 사용한 네개의 수직 모멘트 이외에 수직 및 수평방향의 모멘트가 서로 연결된 교차모멘트의 함수로 구성된다. 그리고 교차모멘트는 JPD 에서와는 다르게 거리와 주입에너지의 함수로 표현된다.

$$\sigma_x(y, E) = \sigma_x(E) \left\{ \frac{1}{a} \ln[\exp(ar_1) + \exp(ar_2)] \right\} \tag{3}$$

$$\beta_x(y, E) = \frac{1}{a} \ln[\exp(ar_1) + \exp(ar_2)] \tag{4}$$

(3) 식에서 측면표준편차를 나타내는 교차모멘트 $\sigma_x(y, E)$ 는 에너지의 함수로 나타나는 1차원 표준편차 $\sigma_y(E)$ 와 주입에너지, 깊이 그리고 1차원 평균주

입거리 R_p 등의 함수인 r_1, r_2 와 계수 a 에 의해 표시되고있다. 깊이의존성 첨도 $\beta_x(y, E)$ 는 계수 a 와 r_1, r_2 의 함수이다.

무거운 이온(As, Sb) 에 대한 측면표준편차는 가벼운 이온(B, P)과는 정반대로 벌크쪽으로 갈수록 증가하게 되는데 이는 무거운 이온의 경우 목표원자와의 충돌시 작은 각도로 산란되기 때문이다. 따라서 깊은 영역으로 침투된 무거운 이온은 방향을 바꾸거나 표면쪽으로 되돌아 오는 현상이 매우 작게된다. 즉, 몇번의 충돌후 이온은 측면으로의 이동없이 곧 정지하게되므로 표면에서의 측면표준편차는 작고 반면에 벌크쪽으로 갈수록 이온빔의 퍼짐에 의해 그 값은 증가하게 될것이다.

한편 가벼운 이온의 경우 180° 까지도 반향되므로 에너지 손실없이도 측면으로 산란될 수 있다. 이는 가벼운 이온의 큰 측면표준편차를 설명해 준다. 게다가 침투속도의 감소는 보통 최대 비행거리에서 발생하는 에너지 손실에 의해 지배되므로 이온이 수직방향으로 비행하지 않는 이상 최대거리에 도달하기전에 이미 산란 공정이 발생하게된다. 따라서 이온의 이동에 정지력이 지배적이라면 측면 표준편차는 벌크쪽으로 갈수록 감소하게된다.

측면 분포함수 $p(x, y)$ 는 이들 깊이의존성 교차모멘트를 함수로하는 변형된 Gaussian 분포함수이며 식 (5) 와 같은 형태이다.

$$p(x, y) = a \exp(-|bx|r) \tag{5}$$

여기서 각 계수는

$$\frac{1}{r} = c \cdot (0.290576\sqrt{\beta-1.8}) + (1-c) \cdot 0.678042 \ln \frac{\sqrt{5\beta}}{3} \tag{6}$$

$$c = 0.79583 \exp[-1.94544(\beta-1.8)] + 0.204167 \exp[-0.272172(\beta-1.8)] \tag{7}$$

$$b = \frac{1}{\sigma} \sqrt{\frac{\Gamma(3)}{\Gamma(\Gamma)}} / \Gamma\left(\frac{1}{\Gamma}\right) \tag{8}$$

$$a = (br) / \left\{ 2\Gamma\left(\frac{1}{\Gamma}\right) \right\} \tag{9}$$

로 표시되는데 (8) 식과 (9)식의 $\Gamma(\cdot)$ 는 gamma function 을 나타낸다.

(5)식을 (2)식과 결합시키면 최종적으로 구하고자 하는 주입이온에 대한 2차원 분포를 얻을 수 있다. 그림 3., 그림 4.는 각각 인이온과 안티몬이온을 주입했을때 나타나는 2차원적 이온분포를 보여준다. 주입에너지는 100 Kev, DOSE는 $5 \times 10^{15}/\text{cm}^2$ 이다.

그림안의 숫자는 주입이온의 농도를 대수로 취한값이며 영역은 μm 단위이다. 윈도우는 $x=0.4\mu\text{m}\sim 0.0\mu\text{m}$, 마스크는 $x=0.0\mu\text{m}\sim 0.40\mu\text{m}$ 에 존재하며 실리콘기판의 표면은 $y=0.0\mu\text{m}$ 이다. 그림 3. 에서 최대 농도가 나타나는 깊이는 대략 $0.12\mu\text{m}$ 인데 측면산란이 최대인 지점은 $0.06\mu\text{m}$ 로 가벼운 이온의 측면산란 특성인 최고농도 이전의 최대 측면 산란 효과를 잘 나타내고 있다.

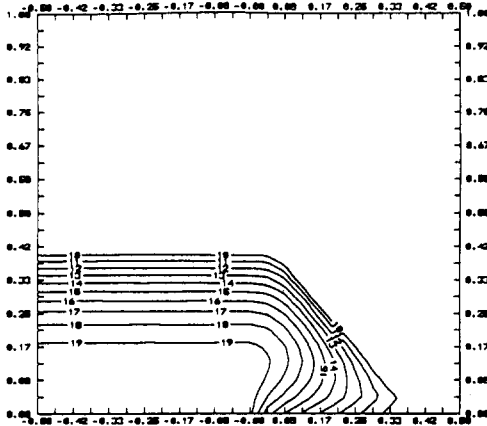


그림 3. 인이온 주입에 대한 2차원 분포
Fig. 3. Two dimensional ion concentration near mask edge. Phosphorus implanted at 100 KeV in silicon.

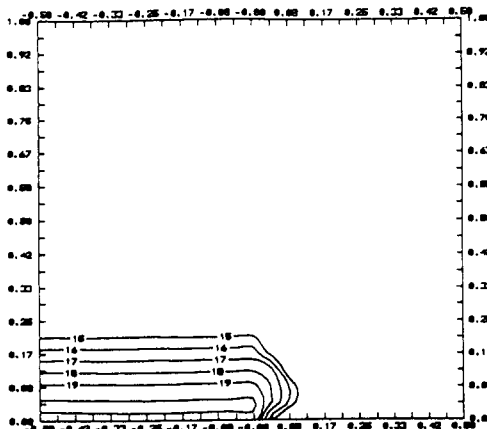


그림 4. 안티몬이온 주입에 대한 2차원 분포
Fig. 4. Two dimensional ion concentration near mask edge. Antimony implanted at 100 KeV in silicon.

그림 4.에서 안티몬 이온의 최고농도는 $0.04\mu\text{m}$ 에서 나타나며 측면산란은 $0.07\mu\text{m}$ 에서 최대를 나타내고있다. 이는 무거운 이온의 측면산란 특성인 최고농도 이후의 최대측면산란 효과를 잘나타내고 있다.

IV. 3차원 모델과 마스크효과

실리콘으로 주입된 이온들의 위치를 예측하기위해 적용되어온 통계적, 해석적 방법들은 모두 원칙적으로 3 차원 모델로의 확장이 가능하다. 이온주입후 형성되는 측면방향 (x방향) 의 깊이의존성 분포를 예측하고 동시에 또 다른 측면 방향, 즉 z 방향으로의 마스크효과를 예측할 수 있는 모델이 요구되어 왔다. 본 연구에서는 이와같은 요구에 부응하는 새로운 3 차원 모델을 구축하였다. 구축된 모델은 깊이 방향의 1 차원 모델인 JPD, 즉 $p(y)$ 와 측면방향(x) 의 깊이의존성 분포함수인 $p(x,y)$ 에 마스크효과를 나타내는 분포함수인 $p(x,z)$ 가 결합된 형태로 되어 있다. 3 차원 모델에 고려되어야할 중요한 변수는 마스크의 모서리부분에서의 이온 분포를 결정하는 파라미터인데 이 파라미터의 값은 마스크의 형태에 의존한다.

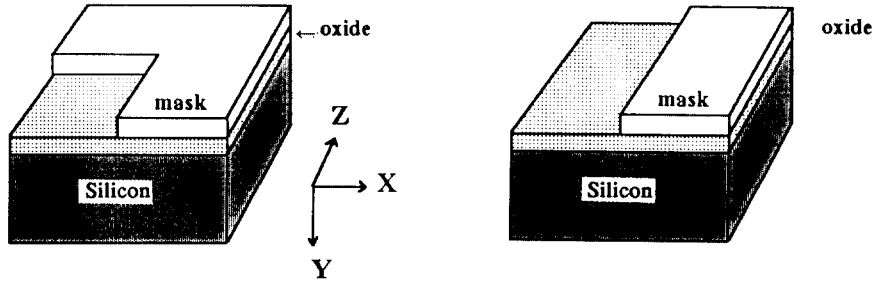
반도체 공정에 이용되는 전형적인 마스크형태가 그림 5. 에 나타나 있다. 선구조(line structure)는 마스크가 일직선 형태를 갖는 것으로 2 차원 분포의 3 차원 확장을 확인하기위한 구조이며 섬구조(island structure)는 섬형태의 마스크만 남도록 식각처리한 구조로서 마스크에 hole 형태의 윈도우를 형성시킨 구조인 孔구조(hole structure)와의 마스크 모서리 부분에서의 이온분포를 대비하여 관찰하기 위하여 선택되었다.

1.2 차원 모델함수를 기본으로 하는 3 차원 이온주입 분포함수는 다음과 같은 식으로 표현된다.

$$f(x,y,z) = p(y) \cdot p(x,y) \cdot p(x,z) \quad (10)$$

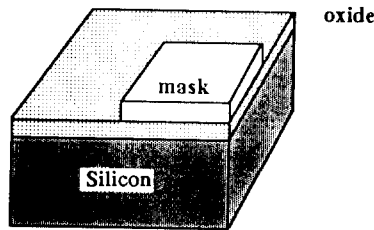
(10)식은 주입된 이온의 3차원 최종분포함수 $f(x,y,z)$ 를 깊이방향(y)의 1 차원 함수와 깊이 의존성 측면(x) 분포를 나타내는 2 차원 함수, 그리고 3 차원 효과를 반영하는 다른 측면방향(z)으로의 분포를 표시하는 2 차원 함수등의 곱의 형태로 나타낸것이다. $p(y)$ 와 $p(x,y)$ 는 이미 구축된 모델이며 3차원 효과가 고려된 분포함수 $p(x,z)$ 는 다음과 같은 식으로 표현되는 2 차원 함수이다.

$$p(x,z) = a \exp \{ -b (z + cx^d + z_v)^e \} \quad (11)$$



(a) 孔구조(hole structure)

(b) 線구조(line structure)



(c) 섬구조(island structure)

그림 5. 전형적인 3 차원 마스크 구조

Fig. 5. Typical three-dimensional mask structures for implantation process.

여기서 계수 a 는 2차원 분포의 최대값을 제어하는 값을 갖게되며 b 는 모서리에서의 농도감소율을, c 는 농도등고선의 변곡점을, d는 변곡점의 변화 기울기를 각각 조정하는 기능을 갖고있다. 또한 z는 변곡점의 시작위치를 제어하고 e 는 마스크 모서리에서의 이온 침투깊이를 조정하는 특성을 갖고있다. b 를 제외한 모든 계수들은 마스크의 형태에 따라 서로다른 값을 갖게되며 b 는 주입에너지를 변수로 하는 다항식으로 표현된다.

(11) 식에 사용된 계수의 마스크 구조에 따른 값은 현상학적인 타당성을 보장하는 방향으로 추출되었는데 각 계수값 변화에따른 분포변화를 추적하여 최적의 분포를 나타낼때의 값을 취한것으로 표 1.에 나타내었다.

표 1. 에서 선구조(Line Structure)에 대한 c,d, e,zv 의 값이 존재하지 않는다. 이는 선구조에서의 분포가 2 차원 분포와 동일하기 때문에 p(x,z) 가 1 인 값을 갖게되고 이는 c,d,e,zv 등에 무관하게 b = 0 로 성취되기 때문이다.

한편 계수 b 는 에너지에 대한 다항식으로 표시되

며 그때 다항식의 상수는 최적 분포를 갖도록 조정되었는데 주입되는 이온별, 마스크 구조별 계수값이 표 2.에 표시되었다.

표 1. 마스크 형태에 따른 3 차원 분포함수의 계수

Table 1. Coefficients for three-dimensional distribution function with mask structures.

	Hole Structure	Line Structure	Island Structure
a	1	1	1
c	1	-	0.3
d	2	-	1
e	2	-	1.5
Zv	0	-	0.25

$$b = \sum_{n=1}^{10} (a_n \cdot E^{n-1}) \tag{12}$$

E : implantation energy

a_n : n - th coefficient

표 2. 이온별, 마스크 구조별 다항식 계수
Table 2. Polynomial coefficients classified by implanted ions and mask structures.

(a) hole structure

n ions	B	P	As	Sb
1	158.4	630.6	650	769
2	-7.03579	-10.5391	-10.5	-8.31239
3	0.562629	0.0504545	0.05	-0.0973335
4	-0.0282023	0.	0.	0.0094161
5	0.000816888	0.	0.	-0.000307823
6	-1.40416E-5	0.	0.	4.94038E-6
7	1.41278E-7	0.	0.	-3.78269E-8
8	-7.6739E-10	0.	0.	1.10878E-10
9	1.73611E-12	0.	0.	0.
10	0.	0.	0.	0.

(b) island structure

n ions	B	P	As	Sb
1	85	110.	266.333	335
2	-1.05	-1.15	-3.78628	-3.3
3	0.005	0.005	0.0727711	0.01
4	0.	0.	-0.00202848	0.
5	0.	0.	3.21848E-5	0.
6	0.	0.	-2.41987E-7	0.
7	0.	0.	6.94444E-10	0.
8	0.	0.	0.	0.
9	0.	0.	0.	0.
10	0.	0.	0.	0.

표 2. 에서 선구조에 대한 b 의 값이 표시되지 않은 것은 항상 영으로 규정되어 있기 때문이다.

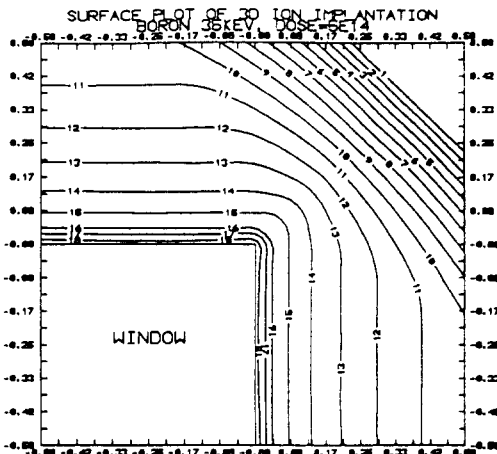


그림 6. 공구조에서의 붕소이온 분포 (에너지 = 35 Kev, DOSE = 5.E14 ions/cm²)
Fig. 6. Boron profiles at surface of hole structure simulated in 3-D. Implantation energy is 35 KeV with 5×10^{14} ions/cm² dose.

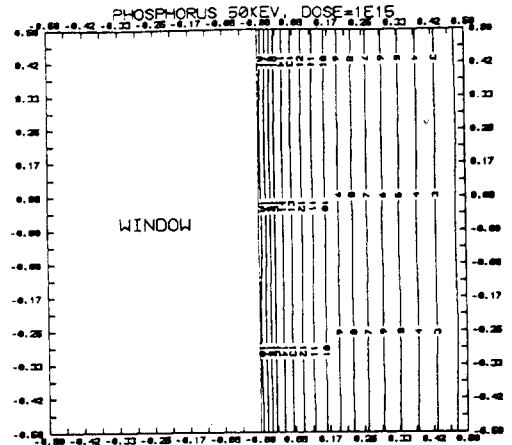


그림 7. 선구조에서의 인 이온 분포 (에너지 = 50 KeV, DOSE = 1E15 ions/cm²)
Fig. 7. Phosphorus profiles at surface of line structure simulated in 3-D. Implantation energy is 50 KeV with 1×10^{15} ions/cm² dose.

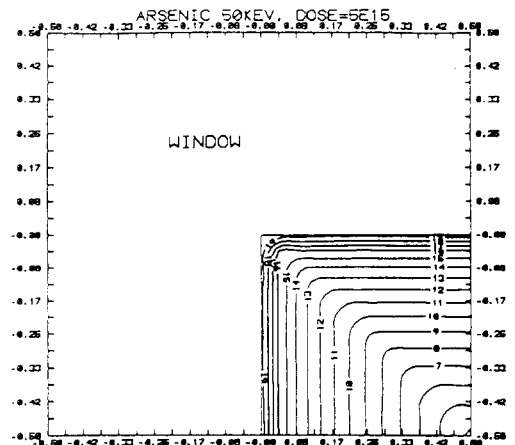


그림 8. 섬구조에서의 비소 이온 분포 (에너지 = 50 Kev, DOSE = 5E15 ions/cm²)
Fig. 8. Arsenic profiles at surface of island structure simulated in 3-D. Implantation energy is 50 KeV with 5×10^{15} ions/cm² dose.

V. 결론

參考文獻

JPD 와 두개의 변형된 Gaussian 함수가 모델로 구현된 3 차원 이온주입 시뮬레이터를 개발하였다. 해석모델을 구현시킴으로서 빠른 수행속도를 보장하였으며 (1-D : 0.503 sec, 2-D : 14.460 sec, 3-D : 21.519 sec : PC-386 elaps time 기준) 깊이방향으로의 산란과 채널링현상, 깊이의존성 측면분포 효과 그리고 마스크효과 등을 고려하여 보다 실제공정에 근접한 결과를 도출하도록 하였다. 특히 3 차원 효과인 마스크효과를 확인하기 위해 마스크의 형태에 따른 세가지의 3 차원 구조를 제안하였다. 공구조와 섬구조의 마스크 모서리에서 발생하는 주입된 이온농도의 변화 예측은 초소형 소자공정상의 측면산화의 최적제어문제, 확산초기의 비정상현상 등의 문제 해결에 중요한 관건이 될것으로 기대된다.

시뮬레이션결과와 실험치와의 비교는 현재까지 알려진 측정기술로는 정확한 2 차원 및 3 차원 불순물 농도 측정이 불가능하기 때문에 이에대한 기술확보가 이루어지기 전에는 곤란한것으로 판단된다. 이는 현재 가능한 2 차원 실험법인 SEM 측정의 경우 정확도가 식각조건에 의존하고 TEM 측정의 경우 불순물 활성화에 의해 정확도가 보장되지 않기 때문이다. 게다가 3 차원적인 실험은 아직 그 기술이 매우 미미한 수준이다. 그럼에도 불구하고 본 연구의 결과에 대한 향상성을 유지하기 위해서 다음과 같은 방안을 수립하였다. 즉, 실험기술이 개발되어 profiling 이 가능하면 바로 그 실험치값을 입력으로 하여 최적의 3 차원 모델 파라미터를 추출할 수 있는 기능을 갖는 별도의 프로그램을 개발 할 예정이다. 현재는 외부에서 파라미터 조정이 가능하도록 코딩되어 있다. 향후 시뮬레이터에는 실험치로부터 추출된 최적파라미터 이외에도 기관의 경사각도, 회전각도, 마스크 각도 및 두께등이 모델변수로 포함될 것이다.

- [1] J.P.Biersack, L.G.Haggmark, "A Monte Carlo Computer Program for the Transport of Energetic ions in Amorphous Targets," Nucl. Inst. Meth, pp.557-569, 1980
- [2] J.Albers, "Monte Carlo Calculation of One- and Two-Dimensional Particle and Damage Distributions for Ion-Implanted Dopants in Silicon," *IEEE Trans. CAD*, Vol CAD-4, No.4, 1986
- [3] A.M.Mazzone, G.Rocca, "Three-Dimensional Monte-Carlo Simulation Part I : Implanted Profiles for Dopants in Submicron Device," *IEEE Trans. CAD*, Vol CAD-3, No.1, 1984.
- [4] Y.Yamamoto, et al, "Recoil Implantation fo Si into GaAs by As Ion Bombardment," Nucl. Inst. Meth., pp392-397, 1987
- [5] K.B.Winterbon, "Computing Moments for Implanted-Ion Range Energy Distributions," Atomic Energy of Canada Limited Rep. pp5536, 1976
- [6] P.D.Townsend, et.al, *Ion Implantation Sputtering and thier Application*, Academic press 1976
- [7] S. Selberherr, *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices*, Springer-Verlag, 1984.

著者紹介

朴 和 植(正會員) 第 29卷 A編 第 12號 參照
현재 미국 Stanford 대학 Post
Doc.

黃 好 正(正會員) 第 26卷 第 7號 參照
현재 중앙대학교 전자공학과 교수



李 俊 賀(正會員)
1966年 10月 10日生. 1990年 2
月 중앙대 전자공학과 졸. 1992年
2月 중앙대 대학원 전자공학과 석
사. 1992年 9月 ~ 현재 중앙대
대학원 전자공학과 박사과정. 관
심분야는 반도체 소자및 공정물
리, 산화 모델링 및 시뮬레이션 등임.