

# <100>방향 실리콘 단결정에서의 저 에너지 붕소 이온 주입 공정에 대한 3차원 몬테 카를로 시뮬레이션 및 마스크 효과

## (Three-dimensional Monte Carlo Simulation and Mask Effect of Low-Energy Boron Ion Implantation into <100>Single-Crystal Silicon)

孫明植\*, 李俊賀\*, 宋榮珍\*\*, 黃好正\*

(Myung Sik Son, Jun Ha Lee, Young Jin Song, and Ho Jung Hwang)

### 요 약

반도체 소자 크기의 감소 추세에 따라 감소되고 있는 이온 주입 영역에 저 에너지로 <100>방향 단결정 실리콘에 주입된 붕소 이온의 마스크 의존성 불순물 도핑 분포를 정확하게 예측하기 위하여 마스크 구조를 고려한 3차원 몬테 카를로 시뮬레이터를 개발하였다. 3차원 시뮬레이터에는 이온 주입 시의 에너지, 웨이퍼의 tilt 및 rotation, 실리콘 웨이퍼의 방향성, 초기 산화층, 이온 주입량, 웨이퍼의 온도, 이온 빔퍼짐, 마스크 오픈 윈도우의 구조, 크기 및 두께와 같은 이온 주입 공정 관련 변수들이 모두 고려되었다. 3차원 시뮬레이터의 신뢰도를 확보하고 성능을 입증하기 위해 3차원 시뮬레이션을 수행하여 얻은 1차원 결과를 SIMS 측정 결과와 비교하였으며, 비교적 정확한 1차원 농도 분포를 얻을 수 있었다. 孔構造의 마스크 구조 및 크기를 고려한 3차원 시뮬레이션을 통하여 붕소 이온 주입 공정에서의 마스크 효과를 예측하였다.

### Abstract

A three-dimensional(3D) Monte Carlo simulator for boron ion implantation into <100>single-crystal silicon considering the mask structure has been developed to predict the mask-dependent impurity doping profiles of the implanted boron at low energies into the reduced area according to the trend of a reduction in the size of semiconductor devices. All relevant important parameters during ion implantation have been taken into account in this simulator. These are incident energy, tilt and rotation of wafer, orientation of silicon wafer, presence of native silicon dioxide layer, dose, wafer temperature, ion beam divergence, masking thickness, and size and structure of open window in the mask. The one-dimensional(1D) results obtained by using the 3D simulator have been compared with the SIMS experiments to demonstrate its capabilities and confirm its reliability, and we obtained relatively accurate 1D doping profiles. Through these 3D simulations considering the hole structure and its size, we found the mask effects during boron ion implantation process.

\* 正會員, 中央大學校 電子工學科  
(Dept. of Electronic Eng., ChungAng Univ.)

\*\* 正會員, 建陽大學校 電子工學科  
(Dept. of Computer Science, KeonYang Univ.)

\* 본 연구는 한국과학재단 출연과제 'Shallow

Junction 및 Direct Writing을 위한 Low Energy Ion Implanter 개발의 Ion Beam Lens(Retarding Lens) 설계 및 제작 연구의 일환으로 수행되었음.  
接受日字: 1995年3月16日, 수정완료일: 1995年7月29日

## I. 서론

공정 시뮬레이션은 집적 소자를 개발하고 그 특성을 이해하는 데 있어서 필수 불가결한 도움을 주어 왔다. 기하급수적으로 증대되고 있는 집적도에 비해 소자 개발 비용 및 기술적 어려움 또한 증대되고 있어서 소자 개발 비용 절감 및 개발 공정 기간 단축의 필요성이 어느 때보다도 크게 대두되고 있다. 물리적으로 정확하고 효율적인 공정 시뮬레이터의 개발은 소자 개발의 효율성 및 신뢰성을 증가시키면서 소자 개발 비용 및 개발 공정 기간을 줄이는 데 크게 기여할 것으로 기대된다. 소자 크기가 작아지면 필수적으로 수평 및 수직 크기가 감소하게 되므로 이온 주입시 저 에너지를 사용하여 보다 얇은 접합 깊이(예를 들면, 1G급의 집적도에서는  $0.08 \mu\text{m}$ , 256M급에서는  $0.1 \mu\text{m}$ )<sup>[1]</sup>를 얻어야 하고, 또한 이온 주입 후의 격자 손상 보상을 위한 열처리 공정(RTA: Rapid Thermal Annealing)에서의 열적 확산을 최소화시켜야만 한다. 따라서 이온 주입 후의 불순물 분포는 그대로 완성된 소자에 강한 영향을 끼치게 되므로 이온 주입 시의 정확한 불순물 깊이 분포와 마스크 구조에 따른 양 측면 분포 예측이 더욱 중요하게 되었다. 현재까지의 이온 주입 모델링은 Gaussian 함수나 Pearson 함수와 같은 통계 분포 함수를 이용한 해석적 접근법과 Boltzmann 수송 방정식을 푸는 방법, 그리고 난수를 도입한 Monte Carlo 법이 있으나, 전자인 경우에 수행 시간은 빠르나 실험 데이터가 없는 경우에는 적용이 어렵다는 단점을 갖고, Boltzmann 수송 방정식인 경우에는 Monte Carlo 법에 비해 계산 효율이 높다는 이점은 있지만 단결정 실리콘과 같은 결정 구조의 3차원 시뮬레이션과 같은 복잡한 구조에서의 적용이 어렵다는 단점이 있다. 이에 비해 난수를 도입한 Monte Carlo 법인 경우에는 수행 효율이 입자 수의 증가에 따라 감소한다는 단점은 있지만, 계산의 정확성과 다층 구조에서도 시뮬레이션이 용이하며 3차원에서의 확장이 가능하므로 현재의 측면 분포 측정이 어려운 입장에서 이온 주입되는 3차원 불순물 분포를 예측 이해할 수 있다는 큰 장점을 갖는다. 따라서 이온 주입되는 마스크 영역에 따른 깊이 분포와 마스크 구조에 따른 양 측면 분포와 같은 다차원 분포를 모두 설명할 수 있는 3차원 Monte Carlo 이온 주입 공정 시뮬레이터의 개발이 필수적으로 요구되고 있다.

붕소 이온이 주입되는 실리콘 기판은 방향성을 갖는 단결정이므로 비정질 목표 물질에서는 나타나지 않았던 결정성에 기인한 channeling 현상과 결정 격자의 손상에 의한 결정의 비정질화(amorphization) 현상들을 모두 고려하여야만 하고, 이온 주입 영역의 감소에 따른 효과<sup>[2]</sup>를 설명할 수 있어야 한다. 그리고, 소자 크기의 감소 추세에 따른 저 에너지의 사용은 결정성에 기인한 channeling 현상을 더욱 심화시키게 된다<sup>[3]</sup>. 따라서, 이러한 현상들을 고려하면서 이온 주입 공정의 많은 공정 조건들-이온 주입 에너지, 결정성에 기인한 channeling, 격자 손상에 의한 비정질화, 웨이퍼의 tilt 및 rotation, 초기 산화층, 이온 주입량(dose), 웨이퍼의 온도에 따른 열적 격자 진동, 이온 빔의 퍼짐, 그리고 마스크 윈도우 구조, 크기 및 두께-를 모두 고려하지 않았던 기존 모델로는 마스크 구조에 기인한 정확한 불순물 분포 예측이 어려울 것으로 예상된다. 따라서, 본 연구에서는 위에서 언급한 현상과 이온 주입 공정 조건을 모두 고려한 저 에너지에서의 3차원 몬테 카를로 이온 주입 공정 시뮬레이터를 개발하고, 시뮬레이션 결과를 분석함으로써 1차원 및 2차원에서는 예측할 수 없었던 3차원적 현상인 마스크 효과를 예측하였다.

본 3차원 이온 주입 몬테 카를로 시뮬레이터는 컴퓨터 수행 효율이 높은 2차원 TRIM 코드<sup>[4]</sup>를 기본으로 하고, MARLOWE 시뮬레이션 모델들<sup>[5]</sup>을 도입 적용하였다. 또한, 컴퓨터 수행시간을 줄이기 위해 단결정 실리콘 웨이퍼의 방향성을 고려한 3차원 격자 구조에서의 효율적인 충돌 탐색 알고리즘<sup>[6]</sup>을 개발하였고, 격자 손상 모델을 새로이 제안 적용하였다. 전자 에너지 손실 모델로는 ABS 모델<sup>[7]</sup>을 사용하였으나 channeling에 의한 정확한 1차원 결과 분포를 얻기 위해 평균 전자 밀도 분포를 변경 적용하였다.

## II. 실리콘 단결정에서의 3차원 Monte Carlo 이온 주입 모델

단결정 실리콘 웨이퍼에 이온 주입이 이루어지면 이온은 이온 주입기에 의해 가속되어 운동에너지를 갖게 되며, 단결정 실리콘 목표 물질 속으로 들어가게 된다. 단결정 실리콘 속에서 운동 에너지에 의해 이온은 실리콘 원자와의 핵 충돌 및 실리콘 원자들 사이에 분포하는 전자와의 충돌로 인해 점차적으로 에너지를 잃으

면서 비행하게 되며 에너지를 전부 잃게 되면 실리콘 목표 물질 속에 정지하게 된다. 따라서, 비정질(amorphous) 실리콘 물질에서의 몬테 카를로 이온 주입 시뮬레이션과는 달리 단결정 실리콘 구조에서는 움직이는 이온의 진행 방향에 따라 단결정 격자 위치에서의 충돌 실리콘 원자를 탐색하고 이때의 산란각 비행 거리를 직접 계산해 나감으로써 실리콘의 단결정 성을 고려할 수 있으므로 이러한 이온의 3차원 궤적을 추적해 나간다면 실리콘 웨이퍼내의 최종 정지 위치를 계산할 수가 있다. 이러한 몬테 카를로 시뮬레이션을 수행하기 위한 기본 가정들은 다음과 같다: 움직이는 이온과 정지 원자간의 핵 충돌에 의한 산란(nuclear scattering)에 의해서만 진행 방향이 바뀌며, 탄성 충돌로 가정한다. 움직이는 이온과 전자간의 충돌 산란(electronic scattering)에 의해 비탄성 에너지 손실이 발생하며, 두 산란 메커니즘은 서로 독립적이다(two binary approximation)<sup>[4] [5]</sup>. 충돌간의 진행은 직선으로 가정한다. 실제 이온 주입시 이온이 마스크에 침투되므로 마스크 모서리 하부의 농도 변화가 발생할 가능성이 있으나, 단순한 수직 모서리를 갖는 마스크 구조를 고려하고 마스크 두께가 이온의 침투를 막을 만큼 충분히 큰 것으로 가정한다. 그리고, 이온 에너지가 5 eV 이하가 되면 이온이 정지된 것으로 간주하며 실리콘 웨이퍼 밖으로 나가게 되면 계산을 중지한다. 따라서, 이러한 독립적인 산란 메커니즘으로부터 이온-원자간의 핵 충돌에 의한 핵 저지력(nuclear stopping power)과 이온-전자간 충돌로 인한 전자 저지력(electronic stopping power)의 합으로 에너지 손실을 계산할 수 있다. 따라서 전체적인 에너지 손실( $S_t$ )은 단위 길이당 에너지 손실로 정의되는 핵 저지력( $S_n$ )과 전자 저지력( $S_e$ )의 합으로 표현된다:

$$S_t = S_n + S_e = \left(-\frac{dE}{dx}\right)_{nuclear} + \left(-\frac{dE}{dx}\right)_{electronic} \quad (1)$$

고전 물리학에서 전하를 띄고 움직이는 이온이나 정지하고 있는 원자간의 탄성 충돌에 의한 에너지 전이(轉移) 메커니즘은 단지 두 점 입자의 질량과 전하, 그리고 입사되는 이온의 초기 속도와 방향에 달려 있다. 움직이는 이온이 지나가면서 원자와 충돌하면 정지 원자는 에너지를 전달받아 반동(recoil)된다. 그리고 움직이는 이온은 에너지를 잃으며 진행 방향이 바뀌게 된다. 산란 후의 두 입자의 산란각은 질량 중심계에서

의 운동량과 에너지 보존 법칙으로부터 구할 수가 있다. 식 (2)와 같은 적분 형태의 산란각 결정식은 계산 효율을 위해 근사화한 ZBL의 Magic Formula<sup>[4]</sup> 를 이용해 계산하였다.

$$\theta = \pi - 2 \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{pdr}{r^2 [1 - V(r)/E_c - p^2/r^2]^{1/2}} \quad (2)$$

여기서,  $r_{min}(r_0)$  은 충돌 시의 원자간 최근접 거리,  $V(r)$ 은 거리에 따른 원자간 전위(interatomic potential),  $p$ 는 충돌 변수(impact parameter)이며,  $E_c$ 는 질량 중심계(center-of-mass coordinates)에서의 총 에너지  $E_c = E_0 / (1 + M_2 / M_1)$ 으로 표현되며,  $M_1$ 과  $M_2$ 는 각각 움직이는 이온과 정지 원자의 질량이다.

1. 핵 에너지 손실의 계산

핵 에너지 손실은 고전 물리학에서 유도된 다음의 식 (3)에 의해 결정된다<sup>[4]</sup>:

$$\Delta E_n = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E_0 \sin^2 \frac{\theta}{2} = \gamma E_0 \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (3)$$

여기서,  $E_0$  는 충돌 전의 이온 에너지이고,  $\gamma$ 는 이온과 충돌 원자와의 질량 비,  $\theta$ 는 질량 중심계에서의 산란각이다.

2. 3차원 공간 좌표계에서의 산란각 및 방위각의 계산  
질량 중심계에서의 산란각  $\theta$  가 결정되면 그림 1(a)의 실험실계(기준 좌표계)로의 각 변환을 위해 다음의 식을 이용한다:

$$\theta = \tan^{-1} \left( \frac{\sin \theta}{\cos \theta + M_1/M_2} \right) \quad (4)$$

3차원 기본 좌표계에서의 계산된 충돌 변수가 최대 충돌 변수 보다 같거나 작다면 핵 산란이 발생한 것으로 간주하고, 이보다 크면 산란을 무시해야 하므로 공간 충돌 변수(impact parameter)의 계산과 충돌 방위각  $\phi$  의 계산(그림 1(b))은 결정 구조를 고려한 충돌 원자 탐색 과정에서 이온의 3차원 진행 방향에 대한 벡터 분해를 이용하여 계산된다<sup>[5] [6]</sup>. 이러한 공간적 진행 방향을 3차원 기준 좌표계로 변환하기 위하여 Euler 변환을 이용<sup>[8]</sup> 해 구한다. 따라서, 기준 좌표계의 X 축으로부터 충돌로 거듭된  $i$  번째 충돌 후의 최종 회전 방위각  $\phi_i$  와 Z 축(깊이 방향)과 Z'''(산란 후의 진행 벡터)축 사이의  $i$  번째 충돌 후의 최종 산란각  $\alpha_i$  는 각각 식 (5)와 (6)으로부터 구한다:

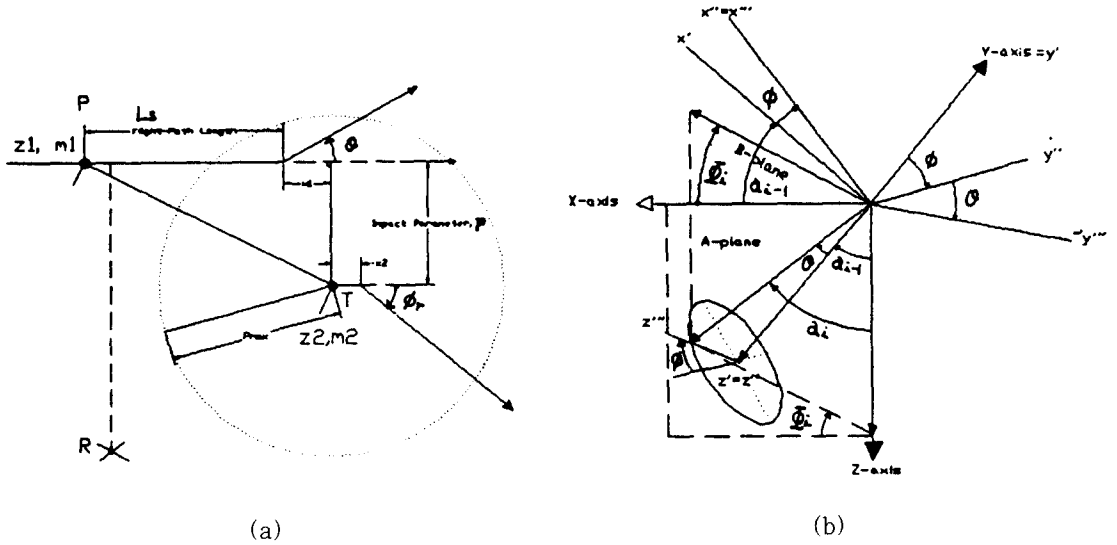


그림 1. (a) 충돌 변수  $p$  및 핵 충돌간 산란 거리  $L_s$ 의 정의<sup>[5]</sup>  
 (b) 3차원 실험실계에서 충돌 후의 이온 진행 방향을 나타내는 산란각과 방위각의 정의<sup>[8]</sup>  
 Fig. 1. (a) Definition of  $p$  impact parameter and  $L_s$  scattering length between two nuclear collisions<sup>[5]</sup>.  
 (b) Definition of ion's moving direction consisting of scattering angle and azimuthal angle after a collision in the 3D laboratory coordinates<sup>[8]</sup>

$$\cos \alpha_i = \sin \vartheta \cos \phi \sin \alpha_{i-1} + \cos \vartheta \cos \alpha_{i-1} \quad (5)$$

$$\phi_i = \phi_{i-1} + \phi_i \quad (6)$$

여기서,  $\phi_i$  는 충돌 전 후의 회전 방위각이며,  $\alpha_{i-1}$  은 기본 좌표계에서의 충돌전 산란각이며,  $\phi_{i-1}$  은 기본 좌표계에서의 충돌전 방위각이다.

### 3. 전자 에너지 손실의 계산

channeling 현상을 설명하기 위해 평균 전자 밀도 ( $n_e$ )가 변경된 ABS 모델<sup>[7]</sup>을 사용하였다. 시뮬레이션 결과 전자 반경(one-electron radius)  $r_s = (3/4\pi n_e)^{1/3}$ 의 값이 0.67248Å 일 때 대체적으로 정확한 분포를 얻을 수 있었다. 여기서,  $v$  는 이온의 속도이며  $x_1$  에서  $x_2$  까지의 적분은 충돌간 비행 거리  $L_s$  를 의미한다.  $S_e$  는 단위 면적당 전자 저지력이고,  $N$  은 목표 물질의 단위 체적당 원자 밀도이다. 그리고 좀 더 빠른 수행 시간을 보장하기 위하여 주입 에너지의 1/1000 간격으로 전자 저지력을 미리 계산한 후 메모리에 table 화하여 사용하였다:

$$\Delta E_e = \int_{x_1}^{x_2} S_e(v, r_s) dx = L_s \cdot N \cdot S_e(v, r_s) \quad (7)$$

그러므로,  $i$  번째 충돌 시의 핵 에너지 손실과  $i-1$  번째 충돌과  $i$  번째 충돌간의 전자 에너지 손실이 계산 되면 식 (8)에 의해  $i$  번째 충돌 후의 남은 이온 에너지를 계산하고 에너지  $E_i$  가 5 eV 이하가 되면 이온이 정지한 것으로 간주한다. 만약 에너지  $E_i$  가 충분하면 계속 이 과정을 반복 수행하며 정지할 때까지 3차원 이온 궤적을 추적해 나간다:

$$E_i = E_{i-1} - \Delta E_e - \Delta E_n \quad (8)$$

### 4. 단결정 실리콘의 비정질화(amorphization)

입사되는 이온이 실리콘 원자간 결합 에너지(15 eV) 이상의 에너지를 실리콘 원자에 전달하게 되면 실리콘 원자(recoiled silicon atom)는 격자 위치를 이탈하여 결공(vacancy)을 발생시키고 비행하게 된다. 만약 에너지가 충분하다면 또 다른 실리콘 원자와 충돌하면서 연속적으로 격자 손상을 일으키게 된다. 그리고 에너지를 모두 잃으면 자신은 틸새형 원자(interstitial)가 된다. 따라서, 이러한 연속적인 격자 손상 과정을 통해 단결정 실리콘은 점차적으로 비정질화(amorphization)된다. 실리콘 원자의 반동 산란각(질량 중심계)  $\phi_{CM}$  은 산란각  $\theta$  가 결정되면

$\phi_{CM} = \pi - \theta = 2\phi$ , (기본좌표계로의 변환각  $\phi$ ,)<sup>[4]</sup>에 의해 구해지며, 또한 이 반동된 실리콘 원자의 궤적도 이온 궤적 추적과 동일하게 구할 수가 있으므로 불순물 분포는 물론 vacancy 와 interstitial 실리콘 원자 분포에 대한 정보를 얻을 수가 있다. 그러나, 이러한 과정은 많은 컴퓨터 수행 시간이라는 대가와 많은 메모리를 필요로 하게 되므로 수행 시간을 효율적으로 줄일 수 있는 새로운 알고리즘이 필요하다. 따라서, 수행 시간의 효율과 정확성을 유지하면서 비정질화 정도를 묘사할 수 있는 효율적인 격자 손상 모델을 도입하였다. 비정질화율은 이온 주입량(ions/cm<sup>2</sup>)에 비례하며, 이러한 격자 손상은 뒤이어 들어오는 이온 궤적에 영향을 끼치게 되므로 이온이 channeling 될 확률은 감소하게 된다. 따라서, 이온 주입량이 증가할수록 깊이에 따른 최고 농도치는 실리콘 표면 쪽으로 위치하게 되는 임의의 산란에 의한 분포를 이루게 된다. 이러한 실리콘 격자의 무질서로 인한 불순물 분포 경향을 정확히 예측하기 위해 각 깊이에서 축적되는 핵 에너지 손실( $\Delta E_n(x)$ ) 정도에 따른 비정질화 확률 함수  $f(x)$ <sup>[9]</sup>를 도입하여 충돌 횟수를 증가시키는 효율적인 경험식을 식 (9)(10)과 같이 제안하였다:

수직 입사 및 *rotation* 없이 *tilt* 만 시킨 경우: (9)  

$$P_{\max \text{ damage}} = P_{\max} \cdot (1 + f(x)^3)$$

*tilt* 및 *rotation* 시킨 경우: (10)  

$$P_{\max \text{ damage}} = P_{\max} \cdot (1 + f(x)^{0.25})$$

여기서, 격자 손상 확률 함수는  $f(x) = 1 - \exp(-\Delta E_n(x)/E_c)$ 이며, 최대 충돌 변수 결정식은  $P_{\max} = a / [ (\epsilon t_{\min} / \gamma)^{1/2} + (\epsilon t_{\min} / \gamma)^{1/4} + 1/8 (\epsilon t_{\min} / \gamma)^{1/20} ]$ <sup>[4]</sup>이다. 그리고,  $E_c$  는 단결정 실리콘이 완전 비정질이 되기 위한 실험치에서 추출한 임계 에너지  $6 \times 10^{23} \text{ eV/cm}^3$ <sup>[9]</sup>이며,  $t_{\min}$  은 최소 핵 전이 에너지로서 보통 5 eV로 초기에 설정하는 값<sup>[4]</sup>으로, 수직 입사시에는 1.5 eV 로 웨이퍼 tilt 시에는 5 eV 로 설정하였다. 그리고,  $\epsilon$  은 이온의 무차원 운동 에너지이며,  $\gamma$  는 충돌 원자간의 질량비이다.

tilt 시에는 5 eV 이하의 작은 충돌을 무시하여 이로 인한 channeling 가능성을 배제하기 위해 최대 충돌 변수를 5 eV 로 설정하였다. 따라서, 충돌 시마다 축적되는 핵 에너지 손실 정도에 따라 격자 손상 확률을 계산하고 손상 확률만큼 증가된 최대 충돌 변수

( $P_{\max \text{ damage}}$ )를 결정한다. 그리고, 단결정 실리콘 격자 구조에서 계산된 충돌 변수  $p$  가 격자 손상을 고려하지 않은  $P_{\max}$  보다 크다면 interstitial 원자에 충돌한 것으로 가정하고, 이때의 최대 충돌 변수는 실리콘 농도  $N$  에 의해 결정되는  $\pi P_{\max}^2 = N^{-2/3}$  를 사용하고, 난수를 이용해  $P_{\max} \times \sqrt{R_n}$  으로 다시 충돌 변수  $p$  를 재결정한다. 그렇지 않은 경우는 그대로 계산된 충돌 변수  $p$  가 사용된다. 따라서, 이상적인 격자 구조는 변하지 않으면서 새로운 변수  $P_{\max \text{ damage}}$  에 의해 이상적인 격자 구조의 격자 손상 효과를 나타내었다. 이는 단순히 충돌 확률을 높여 줌으로써 가벼운 붕소 이온 주입과 같은 경우에 발생할 수 있는 부분적인 비정질화로 인한 channeling 가능성을 배제할 수 없다는 물리적 현상과 일치한다.

5. 이온 주입 시의 공정 변수 모델링

1) 입사 위치의 결정 및 빔 퍼짐의 고려

입사 면적(오픈 마스크 영역) 내의 입사 위치를 0-1 사이에 고르게 분포된 난수  $R_n$  을 이용해 초기 위치를 결정하고, 이때의 초기 입사 각도는 빔퍼짐 각도  $\theta_d$  를 고려해 수직 입사시에는  $R_n \times \theta_d$  로 결정하였다. 또한, 웨이퍼 tilt 시에는  $\theta \pm R_n \theta_d$  로 고려하였다. 시뮬레이션에서는 빔퍼짐 각  $\theta_d$  를 실험 조건<sup>[11]</sup>과 동일하게 0.5° 로 설정하였다.

2) tilt 시의 마스크 두께에 의한 shadow 효과

오픈 마스크 모서리 부로 마스크를 뚫고 들어오는 이온의 영향으로 마스크 모서리의 농도 변화가 예상되어 마스크 층을 고려해야 하지만, 시뮬레이션의 수행 효율을 위하여 마스크는 충분히 이온 주입을 막는다고 가정하였다. 마스크 모서리에서의 이온 주입 농도 변화를 무시하고 오픈 마스크 영역의 구조와 마스크 두께 의존성만을 고려하였다. 따라서 웨이퍼 tilt 시에는 마스크 두께에 의한 shadow 면적만큼 감소된 면적으로 입사되므로 shadow 부분의 면적에는 이온 주입이 이루어지지 않도록 이온 주입 면적을 줄였다.

3) 격자 열 진동(thermal lattice vibration) 효과  
 상온에서 이온 주입이 이루어지더라도 이상적인 격자 원자는 웨이퍼 자체 온도에 의해 진동한다. 이러한 진동 효과는 dechanneling 의 가능성을 높여 주게 되어 이를 무시할 경우 실험 측정 분포와의 오차를 크게 한다. Debye 모델<sup>[5]</sup>을 사용하여 이상적인 격자 위치에서의 평균 이탈 거리( $X_{ms}$ )를 계산한다. 그러나,

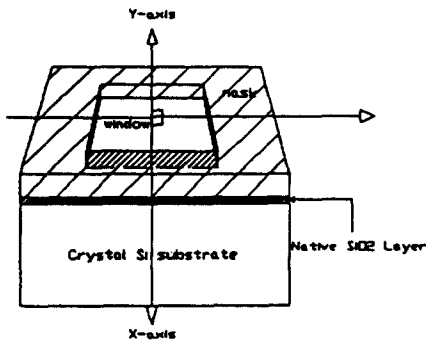
충돌 시마다 난수를 이용해 이탈 위치를 결정하고 이에 따라 충돌 여부를 결정한다는 것은 수행 시간의 증가라는 대가를 치르게 되므로 비효율적이며, 또한 아직도 결정 격자 구조에서의 3차원 진동 효과에 대한 정확한 이론이 없는 실정이므로 원자의 이상적인 위치에서 방사적으로 진동한다고 가정하였다. Debye 모델을 이용하여 평균 격자 이탈 거리 ( $X_{rms}$ )를 계산한 후 0-1 사이에 고르게 분포된 난수  $R_n$ 을 이용해  $(X_{rms}/2) \times R_n$  으로 결정하면 최대 충돌 변수는 방사적으로 평균 이탈 위치에 의해 커진다. 따라서, 이상적인 위치에서 계산된 충돌 변수의 방향으로 정상 위치에서 이탈된 것으로 가정하고 이상적 위치에서의 계산된 충돌 변수  $p$  에서 난수로 결정된 이탈 위치 거리를 빼 주었다. Debye 근사식은 다음과 같다:

$$X_{rms} = 12.1 \{ (\theta(t) + 1/4) / (M_2 \theta) \}^{1/2} \quad (11)$$

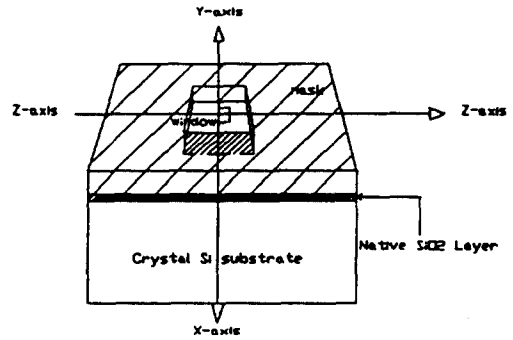
여기서  $\theta(t)$ 는 적분 형태의 Debye 함수이며,  $M_2$ 는

목표 물질의 원자 질량, 그리고,  $\theta$ 는 Debye 온도 (543K)이며,  $t = \theta/T$  이다. 계산 결과에 의하면 상온 (300°K)에서도 평균 0.076Å 크기의 진동 폭으로 격자 원자는 진동하고 있다.

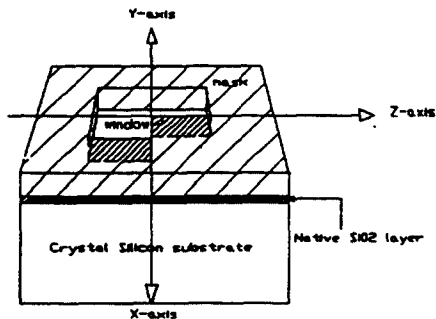
4) 초기 산화층(native silicon dioxide layer) 모델 웨이퍼 자체의 초기 SiO<sub>2</sub>층은 비정질(amorphous)로 가정하고 산화층 두께는 10Å으로 고려하였다. 이러한 산화층을 고려하지 않고 이상적인 표면을 가정할 경우에는 입사 시의 이온 channeling이 커져서 측정 결과와의 오차가 커진다. 초기 산화층 내의 3차원 산란은 TRIM85 코드(비정질 물질에서의 2차원 Monte Carlo 시뮬레이션 코드<sup>[4]</sup>)를 3차원으로 확장하여 사용하였다. 따라서, 시뮬레이션 구조는 실리콘 웨이퍼 위에 초기 산화층이 10Å 덮여 있는 구조이다. 구성비에 따라 난수(random number)로 실리콘과 산소 원자와의 충돌 여부를 결정한다.



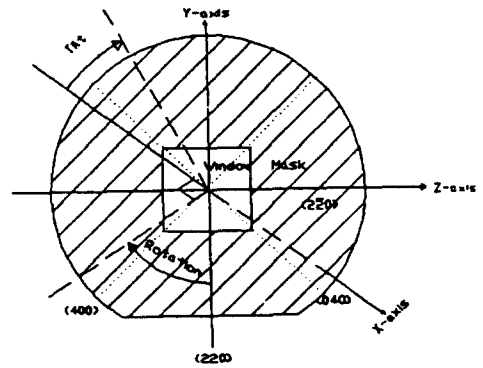
(a) 정사각형 윈도우 孔構造



(b) 직사각형 윈도우 孔構造



(c) 3/4-정사각형 윈도우 孔構造



(d) 실리콘<100> 방향 웨이퍼의 tilt 및 rotation 각

그림 2. 시뮬레이션을 위한 마스크 구조 및 웨이퍼 tilt 및 rotation 정의

Fig. 2. The mask structures for 3D simulations and the definition of tilt and rotation of wafer:

- (a) the perfect-square window in the hole structure
- (b) the rectangular window in the hole structure
- (c) the 3/4-perfect-square window in the hole structure
- (d) tilt and rotation angles of Si<100> wafer

III. 시뮬레이션 마스크 구조 및 3차원 결과

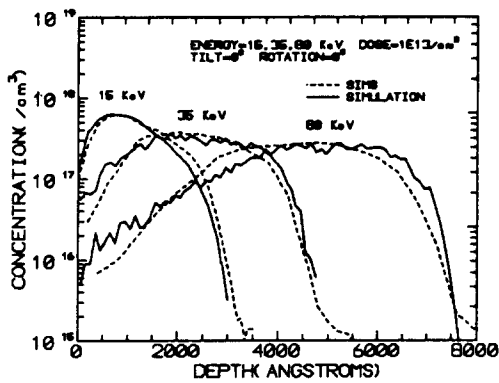
1. 시뮬레이션 마스크 구조

그림 2 는 모의 실험한 마스크 구조를 나타내고 있다. 그림 2의 (a), (b), (c)는 각각 정사각형, 직사각형 및 3/4-정사각형 윈도우를 갖는 孔構造이다. 웨이퍼의 tilt 및 rotation 정의를 그림 2(d)에 나타내었다. 공정 조건은 참고 문헌의 실험 조건<sup>[11] [12] [13]</sup>과 일치시켰다. 시뮬레이션 결과를 보이기 위한 3차원 농도 분포를 각 면에 투영하여 얻은 2차원 결과로 나타내었다.

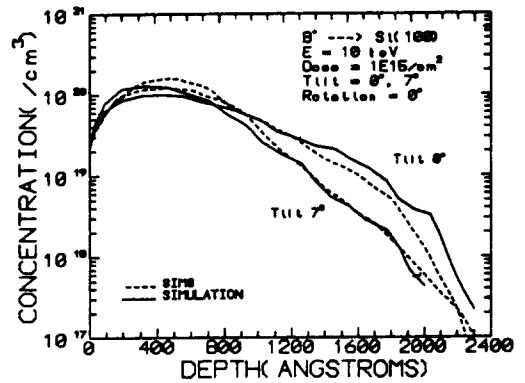
2. 1차원 SIMS 측정 깊이 분포와의 비교

그림 3. 에 3 차원 시뮬레이션 결과를 1 차원

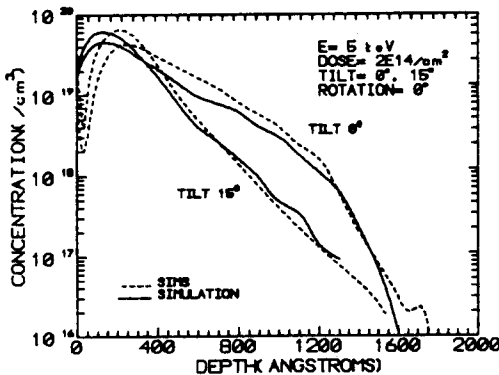
SIMS 실험치<sup>[11] [12] [13]</sup>와 비교하여 나타내었다. 1차원 분포는 비교적 잘 일치하고 있으며, 그림 3(d)에는 웨이퍼 0°, 4°, 7°, 9° tilt 시의 시뮬레이션 결과와 rotation 효과를 보이기 위하여 7° tilt, 30° rotation 시의 결과를 함께 나타내었다. 비교적 낮은 이온 주입량인 1E13/cm<sup>2</sup> 에선 잘 일치하고 있고, 10 KeV의 이온 주입량 1E15/cm<sup>2</sup> 에서도 오차가 비교적 작았다. 특히, 5 KeV와 같은 낮은 에너지에서 최고 농도치가 실험치에 비해 실리콘 웨이퍼의 표면쪽으로 치우쳐 있는 데, 이러한 부정확성은 붕소 이온인 경우 1 KeV 이하에서 특히 중요한 산란 메커니즘인 다원자간 동시 충돌<sup>[14]</sup>을 연속적인 핵 충돌로 근사화한 모델의 부정확성에 기인한 것으로 여겨진다.



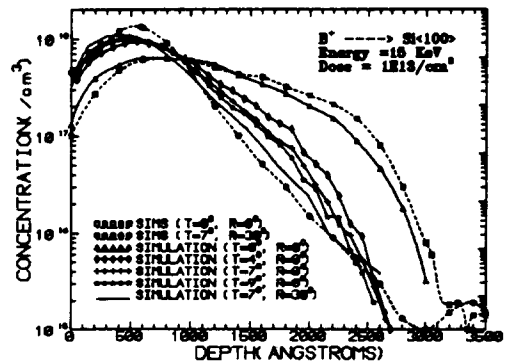
(a) 15, 35, 80 KeV (0° tilt and 0° rotation)



(b) 10 KeV (7° tilt and 0° tilt, 0° rotation)



(c) 5 KeV (0° tilt and 7° tilt, 0° rotation)

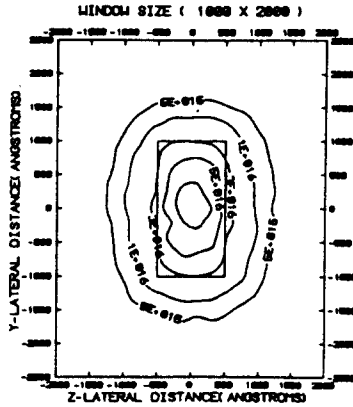


(d) 15 KeV (7° tilt and 30° rotation)

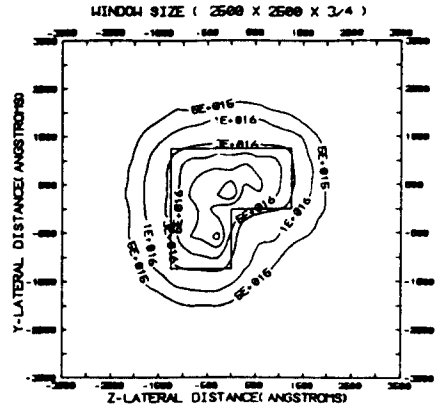
그림 3. 1차원 시뮬레이션 결과와 SIMS 측정 결과<sup>[11] [12] [13]</sup> 비교;

이온주입량(dose) (a) 1×10<sup>13</sup>/cm<sup>2</sup> (b) 1×10<sup>15</sup>/cm<sup>2</sup> (c) 2×10<sup>14</sup>/cm<sup>2</sup> (d) 1×10<sup>13</sup>/cm<sup>2</sup>

Fig. 3. Comparison of the simulation results with the experimental SIMS results<sup>[11] [12] [13]</sup> at dose of (a) 1×10<sup>13</sup>/cm<sup>2</sup> (b) 1×10<sup>15</sup>/cm<sup>2</sup> (c) 2×10<sup>14</sup>/cm<sup>2</sup> and (d) 1×10<sup>13</sup>/cm<sup>2</sup>, respectively.



(a) 직사각형 윈도우



(b) 3/4-정사각형 윈도우

그림 4. 孔構造에서의 마스크 코너 효과

Fig. 4. The effect of mask corner in the hole structure: the simulation results (a) in the rectangular window and (b) in 3/4-perfect-square window

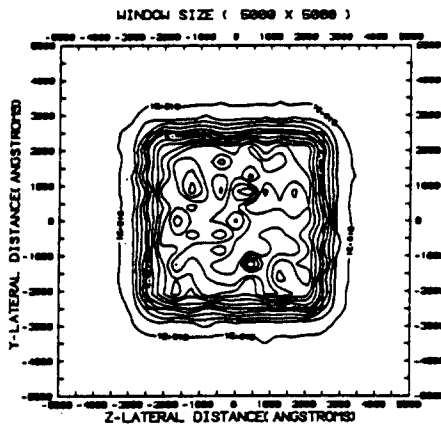
3. 마스크 구조에 의한 마스크 코너 효과

그림 4(a)는 직사각형 孔構造(윈도우 영역:  $1000 \times 2000 \text{ \AA}^2$ )에서의 농도 분포인데, 정사각형 윈도우 孔構造(그림 5)에 비해 줄어든 모서리 코너 부의 영향을 더 강하게 받고 있음을 알 수 있다. 이는 마스크 코너 영역에서의 단위 면적당 입사 이온의 감소로 산란되어 들어 오는 이온량의 감소에 기인한 현상으로 여겨진다. 그림 4(b)는 3/4-정사각형 孔構造(윈도우 영역:  $2500 \times 2500 \times 3/4 \text{ \AA}^2$ )에서의 농도 분포인데, 3/4-정사각형 윈도우 孔構造의 한 특정 코너부의 농도 분포를 보면 다른 코너 부에서의 측면 산란보다 더 진행되었음을 알 수 있다. 이는 섬構造의 코너 부에서는 두 모서

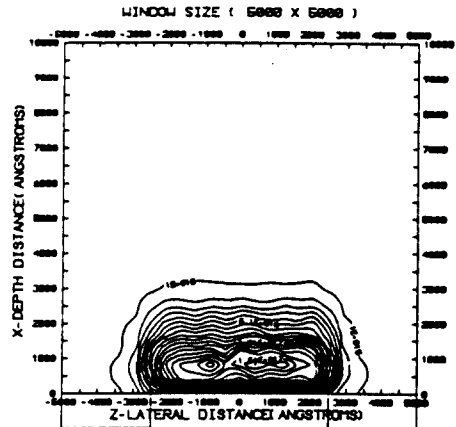
리에서의 단위 면적당 입사 이온의 중첩 증가로 산란 되어 들어오는 이온량이 증가되어 일어나는 현상으로 여겨진다. 시뮬레이션 결과는 각 마스크 윈도우 구조에서 에너지 15 KeV, 이온 주입량  $1 \times 10^{13}/\text{cm}^2$ ,  $0^\circ$  tilt,  $0^\circ$  rotation 에서의 붕소 이온 주입시의 결과이다.

4. 정사각형 윈도우 孔構造에서의 마스크 오픈 윈도우 감소 효과

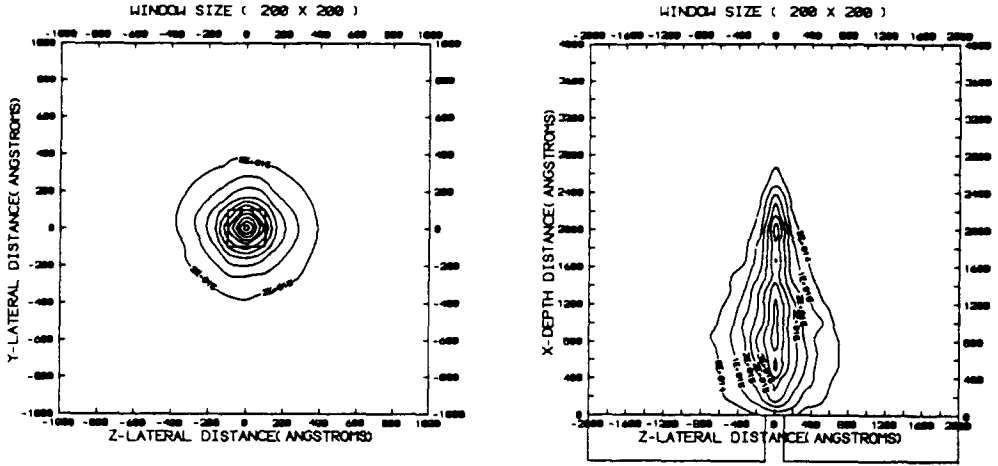
그림 5. 에 dose  $1 \times 10^{13}/\text{cm}^2$ , 입사 에너지는 15 KeV, 웨이퍼 tilt 및 rotation 각은 각각  $0^\circ$  일 때 정사각형 윈도우의 가로 및 세로의 길이를 각각 5000 Å, 2500Å, 1000Å, 200Å 으로 줄여 감에 따라 얻



(a)  $5000 \times 5000 \text{ \AA}^2$  영역에서의 양 측면 농도 분포와 깊이에 따른 측면 분포







(b) 200 × 200 Å<sup>2</sup> 영역에서의 양 측면 농도 분포와 깊이에 따른 측면 분포

그림 5. 정사각형 윈도우 孔構造의 마스크 오픈 윈도우 크기 감소 효과

Fig. 5. The effect of the reduced size of the perfect-square open window in the hole structure: the two-lateral concentration profile and depth-lateral profile in the implanted area of (a) 5000×5000 Å<sup>2</sup> (b) 200×200 Å<sup>2</sup>.

은 이온 분포 결과 중에서 5000×5000 Å<sup>2</sup>(그림 5(a)), 200×200 Å<sup>2</sup>(그림 5(b)) 영역에서의 양 측면 분포(Y-Z 평면에서의 투영농도)와 깊이에 따른 측면 분포(X-Z 평면에서의 투영 농도)에 대한 결과만을 나타내었다. 이온 주입 영역의 감소 효과를 보기 위해 정사각형 윈도우 孔構造에서 윈도우 모서리 길이를 가로, 세로 똑같이 변화시켰고, 이때의 감소된 이온 주입 영역에서의 농도 분포는 점점 원형화되는 3차원적 마스크 의존성인 이온 주입 영역 감소에 따른 불순물 측면 농도 분포의 원형화 현상을 예측하였다. 이는 마스크 크기에 반비례해서 점점 측면 분포가 상대적으로 커짐을 의미한다. 따라서, 이러한 원형화 현상은 반도체 소자 크기의 극소형화 추세에 있어서 원하는 형태의 불순물 도핑 분포를 얻기 위해 극복해야 할 과제가 될 것으로 여겨진다. 따라서, 이러한 마스크 하부의 측면 산란 제어 및 깊이 분포에 대한 channeling 제어가 소자 극소형화에 있어서 중요한 관건이 될 것으로 예상된다.

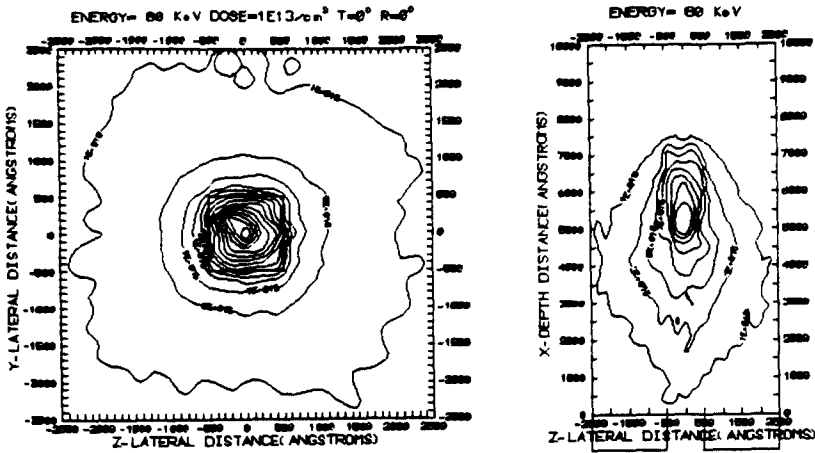
5. 정사각형 윈도우 孔構造에서의 에너지에 따른 3차원 결과

그림 6에 1000×1000 Å<sup>2</sup> 영역에 에너지 15, 35, 80 KeV, 이온 주입량 1×10<sup>13</sup>/cm<sup>2</sup> 으로 웨이퍼에 수직

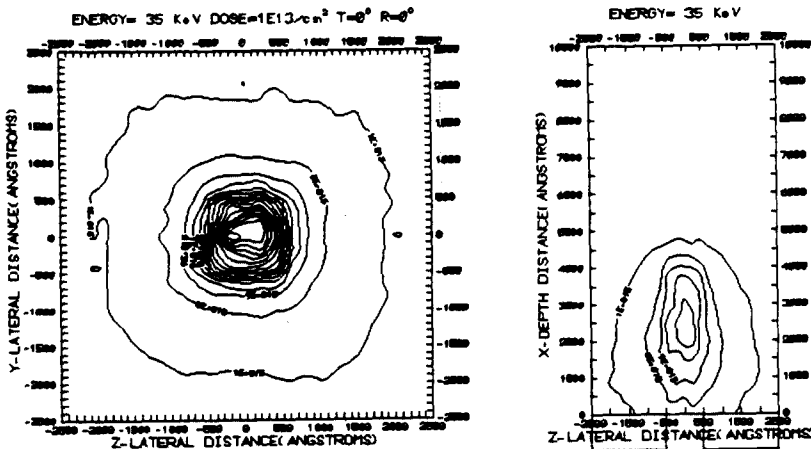
입사 시의 마스크 효과와 함께 깊이에 따른 측면 농도 분포를 나타내었다. 마스크 양 측면 분포(Y-Z 평면에서의 투영 농도 분포)를 보면 에너지 감소에 따라 측면 분포가 감소하고는 있으나 단결정 실리콘에서는 에너지 감소에 비례해 선형적으로 감소하지는 않는다는 사실을 보여주고 있다. 반도체 소자의 극소형화를 이룩하기 위해서는 본 연구에서 예측한 단결정 실리콘 웨이퍼에서의 에너지 감소에 따른 비선형적 측면 산란 현상을 깊이 분포에 대한 channeling 제어와 함께 반드시 고려되어야 할 현상으로 여겨진다. 또한, 에너지 감소에 따른 붕소 이온 주입시의 깊이에 따른 측면 산란 분포(X-Z 평면에서의 투영 농도 분포)를 보면 高에너지에서는 깊은 실리콘 벌크(bulk)쪽에서 큰 측면 산란을 나타내며, 에너지가 감소할 수록 이러한 최대 측면 산란과 최고 농도치가 실리콘 벌크쪽으로 이동하는 에너지 의존성 불순물 농도 분포 및 가벼운 붕소 이온 주입의 특성인 최고 농도치 이전의 최대 측면 산란 현상을 잘 나타내고 있다. 또한, 15 KeV 와 같은 저 에너지에서도 마스크 측면 하부로의 농도 분포는 결정성에 기인한 면 채널링(planar channeling)과 축 채널링(axial channeling) 현상의 증가<sup>[3]</sup>로 작은 이온 주입 영역에 비해 상대적으로 큰 측면 산란 분포와 깊이 분포를 나타내고 있다.

6. 웨이퍼 tilt시 마스크 두께에 의한 shadow 효과  
 그림 7에 입사 에너지 5 KeV, dose  $2 \times 10^{14}/\text{cm}^2$  의 동일 조건에서 15° tilt 와 0° tilt 시의 불순물 농도 분포 차이를 비교하기 위해 나타내었다. rotation은 0° 이고 윈도우는 정사각형 영역이며, 윈도우 크기는  $1000 \times 1000 \text{ \AA}^2$  영역이며, 마스크의 두께는 500Å 으로 설정하였다. 그림 7(a)의 결과에서 보는 바와 같이 웨이퍼에 수직 입사 시에는 양 측면 방향의 분포가 거의 대칭 구조를 이루고 있으나, tilt 시에는 마스크 두께에 의한 shadow effect 및 <100>방향 실리콘 웨이퍼에서의 (220)면 방향(마스크 좌표에서는 -Y 방향)으로의 면 채널링(planar channeling)을 피할 수

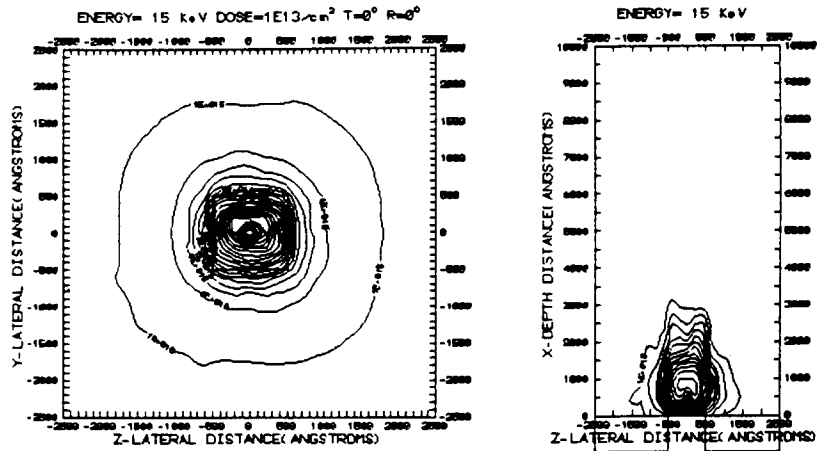
가 없으므로 전체적 농도 분포는 -Y 방향으로 쏠려 있으며, shadow 현상으로 인해 shadow 영역의 모서리 부분에 있어서의 등농도선은 0° tilt 시에 비해 줄어든 형상을 나타내고 있다. 따라서, tilt 효과 및 shadow 현상에 의해 X-Y 투영면(그림 7(b)에서는 좌우 비대칭 구조를 이루게 된다. 그러나, 웨이퍼를 rotation 시키지 않았으므로 X-Z면(그림 7(c))에서는 거의 좌우 대칭 구조를 이루고 있음을 알 수가 있다. 그림 7. 은 전형적인 3차원 시뮬레이션을 보여주면서, 동시에 15° tilt 시의 비대칭 불순물 분포와 0° tilt 시의 대칭 분포와의 차이를 잘 나타내고 있다. 여기서, 실선 및 점선 모두는 등농도선을 나타내며, 최외각 등농도선



(a) 에너지 80 KeV 에서의 양 측면 농도 분포 및 깊이에 따른 측면 분포



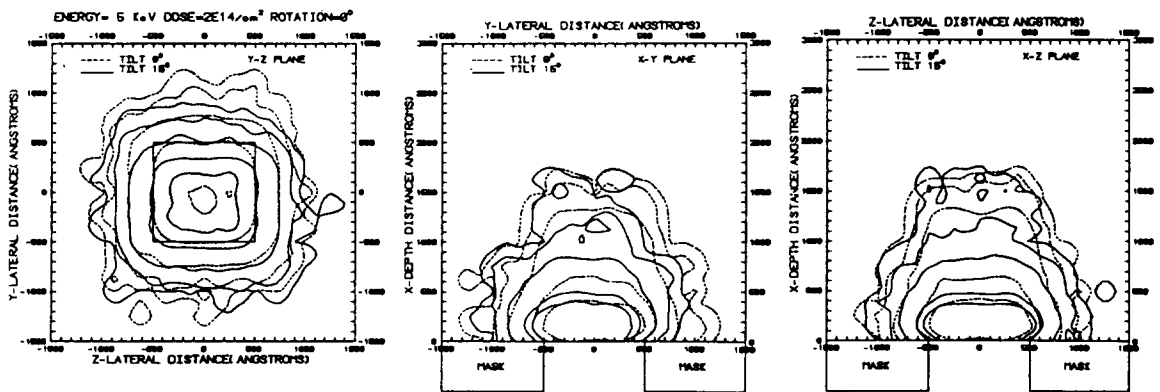
(b) 에너지 35 KeV 에서의 양 측면 농도 분포 및 깊이에 따른 측면 분포



(c) 에너지 15 KeV 에서의 양 측면 농도 분포 및 깊이에 따른 측면 분포

그림 6. 정사각형 윈도우 孔構造에서 에너지에 따른 3차원 결과

Fig. 6. The 3D simulation results at different low energies in the hole structure with the perfect-square window: the two-lateral concentration profile and depth-lateral profile at (a) 80KeV, (b) 35 KeV, and (c) 15KeV.



(a) Y-Z 면으로의 투영 농도

(b) X-Y 면으로의 투영 농도

(c) X-Z 면으로의 투영 농도

그림 7. 웨이퍼 tilt 시의 shadow 효과: 에너지 5 KeV, dose  $2 \times 10^{14}/\text{cm}^2$ ,  $0^\circ$  rotation 에서  $15^\circ$  tilt 와  $0^\circ$  tilt 시의 3차원 시뮬레이션 결과 비교

Fig. 7. The shadow effect due to wafer tilt: Comparison of 3-Dimensional results between  $15^\circ$  tilt and  $0^\circ$  tilt at energy 5 KeV, dose  $2 \times 10^{14}/\text{cm}^2$ , rotation  $0^\circ$ .

은  $1E15/\text{cm}^2$  이며, 한 차수씩 증가한 등농도선으로 표시하였고, 표시된 최대 등농도선은  $2E18/\text{cm}^2$  이다.

#### IV. 결론

단결정 실리콘<100> 방향 웨이퍼에서의 격자 구조

를 고려한 3차원 Monte Carlo 이온 주입 시뮬레이터를 개발하였고, 이를 이용하여 붕소 이온 주입 시의 결정 구조에 기인한 channeling 효과 및 마스크 구조에 따른 측면 분포를 예측하였다. 100A 정도의 해상력을 갖는 측정 기술의 부족<sup>19)</sup>으로 2차원 및 3차원에 대한

정확한 농도 분포 측정이 어려운 실정에서 비교적 정확한 물리적 접근법인 Monte Carlo 시뮬레이션을 이용하여 저 에너지에서 마스크 크기가 감소할 때의 이온 주입 불순물 분포를 예측하였다. 시뮬레이션 결과 孔構造 마스크에서는 마스크 코너 효과로 인해 측면 농도가 감소하고 있고, 섬構造에서는 증가되고 있다. 이는 마스크 코너 부에 주입되는 단위 면적당 이온량의 감소(孔構造)와 증가(섬構造)에 의한 현상으로 여겨진다. 비교적 낮은 주입 에너지 15 KeV 로 수직 입사 시에 마스크 크기를 감소시켰을 때는 점점 농도 분포가 원형 화됨을 예측하였다. 또한 얇은 접합부를 형성시키기 위해 주입 에너지를 줄이는 경우 저 에너지 이온이 축 채널링(axial channeling) 과 면 채널링(planar channeling)될 임계각(critical angle)이 증가[3] 하게 되므로 7° tilt 주입으로도 얇은 접합 깊이를 얻기가 힘들다. 그래서, 저 에너지 5 KeV 의 붕소 주입 tilt 각을 15° 로 설정하고 입사시켰을 때의 주입 분포를 예측한 결과를 보면 tilt 각이 커지면 마스크 두께에 의한 shadow 현상과 면 채널링(planar channeling)이 증가하게 되므로 전체적인 분포는 tilt 방향으로 치우치게 되고 웨이퍼 rotation 이 없는 경우 tilt 방향에 수직인 면 방향으로 불순물 분포가 대칭 구조를 이루게 된다. 또한 마스크 크기를 고정하고 주입 에너지를 증가시켰을 때의 측면 분포 경향을 보면 가벼운 이온의 특성인 최고 농도치 이전의 최대 측면 산란 효과가 잘 나타나 있고, 에너지에 따라 최대 측면 분포가 깊이 방향으로 더 깊숙이 들어간 위치에서 발생하고 있는 에너지 의존성을 잘 예측하고 있다.

집적도 증가에 따라 필수적인 수평 및 수직 크기의 감소와 저 에너지 이온 주입에 대한 마스크의 영향을 예측하였다. 이러한 변화 예측은 초소형 소자 제조를 위한 RTA 공정에서의 측면 및 깊이 방향 확산 분포의 최적 제어와 이온 주입 후의 Drive-in 확산 초기의 비정상 현상 등에 대한 문제 해결에 중요한 관건이 될 것으로 기대되며, 현재의 2차원 측정법인 SEM 및 TEM 측정 기술의 정확도가 보장되지 않는 상황에서 3차원 분포를 이해할 수 있는 한 방법이 될 것으로 기대된다.

본 연구 결과의 항속성을 유지하기 위해 P, As, Sb, Ga 과 같은 도핑 이온 주입과 <110> 및 <111> 방향 실리콘 단결정에서도 시뮬레이션 가능하도록 프로그램 코드를 보완 확장해 나갈 필요성이 있다.

## 참 고 문 헌

- [1] 김홍균, "0.1  $\mu\text{m}$  DVC 연구개발 방향," 기술정보 통권 164 호, 삼성전자
- [2] 박화식, "초고집적 반도체 공정에서의 다차원 효과 - 이론과 시뮬레이션," 박사 학위논문, 중앙대학교, 서울, 12월, 1992
- [3] C. Park, K.M. Klein, and A.F. Tasch, "Critical angles for channeling of Boron Ions Implanted into Single-Crystal silicon," J. Electrochem. Soc., vol. 138, no. 7, pp. 2107-2115, 1991.
- [4] J.F. Ziegler et. al. The stopping and Range of Ions in Solids, vol. I. New York : Pergamon, 1985.
- [5] M.T. Robinson and M. Torrens, "Computer Simulation of atomic displacement cascades in Solids in the binary collision approximation," Phys. Rev. B., vol. 9, no. 12, pp. 5008-5024, 1974.
- [6] 손명식, 황호정, "Monte Carlo 이온 주입 공정 시뮬레이션을 위한 단결정 실리콘 웨이퍼의 방향성을 고려한 효율적인 충돌 탐색 알고리즘," 전자공학회논문지에 투고 예정
- [7] Cheruvu S. Murthy and G.R. Srinivasan, "Computer Simulation studies of Ion Implantation in Crystalline Silicon," IEEE Trans. on Elec. Devices., vol. 39, no. 2, pp. 264-273, 1992.
- [8] Shinji Onga et. al. "A Three-Dimensional Monte Carlo Ion Implantation Process Simulation and Its Application to BF<sub>2</sub> Ion Implantation Processing," 電子通信學會論文紙, vol. J69 - C, no. 5, pp. 540 - 547, 1986.
- [9] K.M. Klein, C. Park, S.H. Yang, A.F. Tasch, "Accurate and Efficient Two-Dimensional Modeling of Boron Ion Implantation into Single-Crystal Silicon," IEEE IEDM Tech. Dig., 27.2.1-4, 1991.
- [10] H.J. Kang et. al. "Computer Simulation of damage processes during ion implantation," J. Appl. Phys., vol. 62, no. 7, pp. 2733-2737, 1987.
- [11] Kevin M. Klein et. al. "Monte Carlo

Simulation of Boron Implantation into Single-Crystal Silicon," IEEE Trans. on Elec. Devices, vol.39, no.7, pp.1614-1621, 1992.

[12] A.E.Michel et. al, "Channeling in low energy Boron ion implantation," Appl. Phys. Lett. 44(4), pp.404-406, 1984.

[13] M.D.Giles and J.F.Gibbons, "Calculation of channeling effects during ion implantation using the Boltzmann trans-

port equation," IEEE Trans. Computer-Aided Des., vol. CAD-4, no.4, pp. 362-368,1985.

[14] G. Hobler, H. Pötzl, "Simulation of Two-Dimensional Implantation Profiles with a Large Concentration Range Crystalline Silicon Using an Advanced Monte Carlo Method," IEEE IEDM Tech. Dig., 27.1.1-4, pp. 693-6, 1991.

— 저 자 소 개 —



孫明植 (正會員)  
 1967년 7월 20일생. 1992년 2월 중앙대학교 전자공학과 졸업. 1995년 2월 중앙대 대학원 전자공학과 석사. 1995년 3월 ~ 현재 중앙대학교 전자공학과 박사과정. 관심분야는 반도체 소자 및 공정 물리, 이온 주입 모델링 및 시뮬레이션 등임.

李俊賀 (正會員) 第 30 卷 A編 第 12 號 參照  
 현재 중앙대학교 전자공학과 박사과정

宋榮珍 (正會員) 第 30 卷 A編 第 3 號 參照  
 현재 건양대학교 전자계산학과 전임강사

黃好正 (正會員) 第 26 卷 第 7 號 參照  
 현재 중앙대학교 전자공학과 교수