

# GSI소자 개발을 위한 극 저 에너지 이온 주입에 대한 분자 역학 시뮬레이션

## (Molecular dynamics simulation of ultra-low energy ion implantation for GSI device technology development)

姜正遠\*, 孫明植\*, 黃好正\*

(Jeong-Won Kang, Myung-Sik Son, and Ho-Jung Hwang)

### 요 약

MD(Molecular Dynamics)를 이용하여 1keV이하의 이온 주입시 점 결함(point defect) 발생을 고려한 이온의 움직임을 시뮬레이션 하였다. 완전한 다이아몬드 구조를 가정하고 SW(Strillinger-Weber) 전위 식과 ZBL 전위 식을 이용하여 실리콘 원자간의 전위와 이온과 실리콘 원자 사이의 전이를 계산하여 실리콘 원자와 이온에 미치는 힘을 계산하였다. 시뮬레이션을 통하여 이온의 점차적인 속도 감소와 이온의 경로 및 높은 도스량으로 여러 이온이 동시에 주입되었을 경우 이온과 실리콘 사이의 쌍이동(coupled-moving) 현상을 시뮬레이션할 수 있었다. 또한 radial distribution function을 사용하여 틸새(interstitial)의 분포를 관찰한 결과 틸새가 주로 덩어리(cluster) 형태로 존재하는 것을 관찰하였다.

### Abstract

Molecular dynamics investigations of ion implantation considering point defect generation were performed with ion energies in the range of ~1keV. Simulation starts perfect diamond cubic lattice site. Stillinger-Weber potential and ZBL potential were used to calculate forces between atoms. We have simulated slowing-down of ion velocity, ion trajectory and coupled-moving between ion and silicon. We also discussed distribution of point defect using radial distribution function. We found that interstitial produced by ion bombardment mainly formed interstitial cluster.

### I. 서 론

반도체 소자의 제조에서 이온 주입은 기본적으로 사용되는 중요한 공정으로 특히 미세 접합 형성을 위해서는 반드시 필요한 공정이다. 이러한 이온 주입은 실

리콘 격자에 점 결함(point defect)을 생성시키기 때문에 후속 공정으로 열처리를 통하여 실리콘 격자를 복구하게 된다. 이러한 열처리 동안에 틸새(interstitial)와 불순물(dopant)의 상호작용으로 TED (Transient Enhanced Diffusion)를 발생시킨다<sup>[1]</sup>. 이러한 TED 현상은 급속 열처리 때의 확산 현상으로 실리콘 내부에서는 격자 원자와 틸새와 불순물간의 상호 작용으로 인한 포텐셜로 인하여 원자들이 이동하기 때문에 발생하는 것이다. 현재 반도체 소자의 극 소형 화됨에 따라서 시뮬레이션 영역이 nanometer 영역으로 되었기 때문에 불순물의 최종 분포를 정확하게 예측하는 것은 더욱 중요하게 되었다<sup>[2]</sup>. 이러한 불순

\* 正會員, 中央大學校 電子工學科 半導體 工程素子 研究室

(Semiconductor Process and Device Lab., Dept. of Electronic Engineering, Chung-Ang Univ.)

※ 본 연구는 1997년도 교육부 학술 연구조성비(반도체 97-E-1018)에 의하여 연구되었음

接受日字:1997年10月24日, 수정완료일:1998年2月26日

물의 최종 분포를 결정하는 TED 양을 정확하게 예측하기 위해서는 이온 주입 공정에서 발생한 점 결함과 불순물의 위치를 정확하게 예측하여야 한다. 또한 점 결함은 물질의 내부에서 주로 발생하는데 현재의 장비로는 내부 원자단위의 측정이 불가능하다. 그러므로 물질의 내부에서 발생한 점 결함 및 이온 분포는 BCA(Binary collision approximation)<sup>[4]</sup> 및 MC(Monte Carlo)<sup>[3]</sup> 과 같은 이온 주입 시뮬레이션에 의해서 이루어져왔다. 하지만 BCA 방법은 이온이 하나의 실리콘 원자와 충돌하는 것으로 가정하고 있고 실리콘 원자간의 상호작용은 무시하고 있기 때문에 BCA 방법은 비정질(amorphous) 상태의 물질에 이온 주입하는데 알맞은 것으로 나타나 있다<sup>[6]</sup>. 기본적인 BCA의 가정 때문에 원자간 다중 상호작용(multiple interaction)을 설명할 수 없는데, 1keV 이하 이온 주입 시에는 실리콘 원자간 상호작용이 중요하게 된다. 이러한 저 에너지 이온 주입에서 원자간 산란을 계산하기 위하여 BCA는 큰 impact parameter를 가지게 되고 현실적인 이온의 에너지 slowing-down 과정을 설명하지 못한다<sup>[11]</sup>. 시뮬레이션 결과 또한 깊이 방향에 대하여 MD보다 2배정도 깊이 들어가는 것으로 나타났다<sup>[7]</sup>. 또한 실리콘 사이의 전위를 계산하지 않는 MC 방법도 한계를 가지고 있다.

MD 방법은 최근에 반도체 분야에서 이온 주입 동안에 발생하는 점 결함의 기본적인 발생과정과 재결합을 연구하는데 사용되고 있으며<sup>[8,9]</sup> 격자결합연구<sup>[10,11,12,13]</sup>, cluster 성장과 해체<sup>[14]</sup>, 분자들의 확산<sup>[15]</sup> 및 원자 진동과 파동에 대한 연구에 이용되고 있다. MD 방법은 계산 량이 많아서 저 에너지 이온 주입에 대하여 시뮬레이션이 수행되고 있는 실정이다<sup>[8,11,13]</sup>. 이러한 한계를 가지고 있지만 보다 현실적인 이온 주입을 시뮬레이션하기 위하여 본 연구에서는 MD(Molecular Dynamics) 방법을 이용하여 Si와 As 이온 주입 시뮬레이션을 하였다. As은 높은 용해성을 가지며 확산계수가 낮기 때문에 초 미세 접합 형성에 알맞다<sup>[20]</sup>. 현재 DRAM 1Gbit 공정에서 n-type drain/source 영역에 15keV As 이온으로 주입하고 있다. 이러한 공정에서 접합 깊이는 약 250nm영역이며 recoil 에너지는 몇 십eV에서 수keV 이하이다.

또한 이온 주입 후 열처리동안에 발생하는 확산현상은 종래의 확산 방정식이 nanometer에서 breakdown

을 일으키게 되어서 nanometer 영역에서는 원자단위의 시뮬레이션이 필요하게 되었다<sup>[2]</sup>. 종래의 확산 방정식은 시뮬레이션 영역이 작아져 시뮬레이션에 사용되는 하나의 메시(mesh)내에 존재하는 원자들이 유한하기 때문에 실험에 의해 맞추어진 종래의 확산 계수는 새로운 확산 계수가 필요하게 되었으며, 또한 원자단위에서 평균적인 확산작용이 발생하지 않을 수 있게 됨에 따라서 원자단위에서 확산을 고려해야 할 필요가 있게 되었다.

본 논문에서는 원자간의 다중 상호작용(multiple interaction)을 SW<sup>[19]</sup>, ZBL<sup>[3]</sup> 식을 사용하여 계산하고 뉴턴의 운동방정식을 이용하여 slowing-down을 계산한다. MD방법은 계산 량이 많지만 보다 현실적인 이온 주입 시뮬레이션이 가능하고 점 결함과 불순물의 보다 정확한 위치 계산이 가능하기 때문에 새로운 시뮬레이션 모델로 대두되고 있다.

## II. 시뮬레이션을 위한 물리적인 조건

일반적인 N개의 동일한 원자들 사이에 작용하는 전위 에너지(potential energy)는 다음과 같이 단일 원자(one-body) 전위, 두 원자간(two-body) 전위, 세 원자간(three-body) 전위 등으로 구성되어 있다.

$$\text{Potential } E(1, \dots, N) = \sum_i v_1(i) + \sum_{i,j \in R} v_2(i, j) + \sum_{i,j,k \in R} v_3(i, j, k) + \dots + v_n(1, \dots, N) \quad (1)$$

단일 원자의 전위  $v_1$ 은 원자가 가지고 있는 에너지를 의미하고 확장된 부분은 원자간의 상호 작용을 나타내는 항이다. 실리콘이 직접적으로 강한 결합을 하고 있는 원자들은 두 원자간 전위와 세 원자간 전위의 결합으로 근사할 수 있다. 이와는 다르게 이온과 실리콘 원자 사이의 전위 에너지는 두 원자간 전위 식으로 근사 된다. 결국 이온의 전위 에너지는 단일 원자 전위와 두 원자간 전위 식의 근사 된다.

위 식에 의해서 Si 및 As 이온 주입에 대한 시뮬레이션을 위한 Si-Si, Si-As, As-As 사이의 원자간 전위 계산은 다음과 같다.

### 1. Si-Si

Si-Si 원자간 전위는 SW(Stillinger-Weber) potential<sup>[19]</sup>을 사용하고, 두 원자간의 반발력은 ZBL potential<sup>[3]</sup>을 사용하여 Gartner et al.의 접

근을 따른다<sup>[17]</sup>. 실리콘의 총 전위는 다음과 같다.

$$E_{total} = \sum_{i \neq j} v_2(r_{ij}) + \sum_{i < j < k} V_3(r_i, r_j, r_k) \quad (2)$$

여기에서,

$$V_2(r) = \begin{cases} V_{ZBL} & , r < r_1 \\ a_0 + a_1 r + a_2 r^2 + a_3 r^3 & , r_1 \leq r < r_2 \\ \epsilon f_2(\frac{r}{\sigma}) & , r_2 \leq r < a \end{cases} \quad (3)$$

$$V_3(r_i, r_j, r_k) = \epsilon f_3(r_i/\sigma, r_j/\sigma, r_k/\sigma) \quad (4)$$

$$f_2(r) = \begin{cases} A(B(\frac{r}{\sigma})^p - (\frac{r}{\sigma})^q) \exp(\frac{r}{\sigma} - a)^{-1} & , \frac{r}{a} < a \\ 0 & , \frac{r}{a} \geq a \end{cases} \quad (5)$$

$$f_3(r_i/\sigma, r_j/\sigma, r_k/\sigma) = h(r_{ij}/\sigma, r_{ik}/\sigma, \Theta_{ijk}) + h(r_{ji}/\sigma, r_{jk}/\sigma, \Theta_{ijk}) + h(r_{ki}/\sigma, r_{ki}/\sigma, \Theta_{iki}) \quad (6)$$

$$h(r_{ij}, r_{ik}, \Theta_{ijk}) = \lambda \exp[\gamma(r_{ij} - a)^{-1} + \gamma(r_{ik} - a)^{-1}] \times (\cos \Theta_{ijk} + \frac{1}{3})^2, \quad r_{ij}, r_{ik} \geq a \quad (7)$$

$$h(r_{ij}, r_{ik}, \Theta_{ijk}) = 0, \quad r_{ij}, r_{ik} < a$$

여기에 사용된 파라미터 값은 다음과 같다.

$$r_1 = 1.8456 \text{ \AA}, r_2 = 3.77 \text{ \AA} \quad (V_2(r_2) = 0)$$

$$A = 7.049556277, B = 0.6022245584, p = 4,$$

$$q = 0, a = 1.8, \lambda = 1.2, \gamma = 21.0,$$

$$\epsilon = 2.167 \text{ eV}, \sigma = 2.0951 \text{ \AA},$$

$$a_0 = 333.0594 \text{ eV}, a_1 = -492.3905 \text{ eV \AA}^{-1},$$

$$a_2 = 244.5280 \text{ eV \AA}^{-2}, a_3 = -41.2347 \text{ eV \AA}^{-3}.$$

## 2. Si-As

Si-As 상호간의 전위는 ZBL potential을 사용한다.

$$V(r) = \begin{cases} V_{ZBL}(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \sum_{i=1}^4 c_i \exp(-d_i \frac{r}{a}) & , r \leq r_c \\ 0 & , r > r_c \end{cases} \quad (8)$$

$$c_1 = 0.02817, d_1 = 0.20162,$$

$$c_2 = 0.28022, d_2 = 0.40290,$$

$$c_3 = 0.50986, d_3 = 0.94229,$$

$$c_4 = 0.18175, d_4 = 2.19980,$$

ZBL screening length는  $a = 0.46850 \text{ \AA} / (Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})$

이고 실리콘에 대한 cutoff 반지름  $r_c = 2.7150 \text{ \AA}$ 이다.

## 3. As-As

As-As 상호간의 전위는 같은 전하를 가지고 있기

때문에 전체적으로 반발력만 존재한다고 가정하고 ZBL potential을 사용한다. As-As에 대한 cutoff 반지름  $r_c = 2.9760 \text{ \AA}$ 이다.

이러한 원자간의 전위에 대한 물리적인 조건으로 MD시뮬레이션을 수행한다.

## III. 시뮬레이션 구조 및 가정

본 연구에서 완벽한 다이아몬드 구조를 가정하여 시뮬레이션 하였고, 시뮬레이션에서 점 결함 분포는 Frenkel pair 점 결함 분포를 가정하였다. 시뮬레이션의 기본 구조는  $54 \text{ \AA} * 54 \text{ \AA}$  정사각형에 높이가  $38 \text{ \AA}$ ,  $54 \text{ \AA}$ 인 경우와  $108 \text{ \AA} * 108 \text{ \AA}$  정사각형에 높이가  $38 \text{ \AA}$ ,  $54 \text{ \AA}$ ,  $108 \text{ \AA}$ 인 경우의 실리콘 원자에 대하여 원자 진동을 무시하기 위하여  $80 \text{ K}$ 에서 수행되었다. 위에서 제안한 물리적인 조건에 따라서 다양한 에너지의 Si와 As 이온의 속도와 위치를  $1 \text{ fsec}$ 마다 계산하였다. 계산하는 기본 구조의 밑면의 원자들은 시뮬레이션동안 움직이지 않는다는 가정하고, 이외의 원자들은 고전적인 분자 역학에 의해서 움직이도록 하였으며 (100)에 대하여 주기적인 경계 조건을 사용하였다<sup>[21]</sup>.

이온의 초기 속도는 이온의 에너지로부터 다음과 같은 식으로 얻어진다.

$$v_{ion, initial} = \sqrt{\frac{2 \times 1.602 \times 6.02 \times P_{ion}}{M_{ion}}} \quad (\text{ \AA / psec}) \quad (9)$$

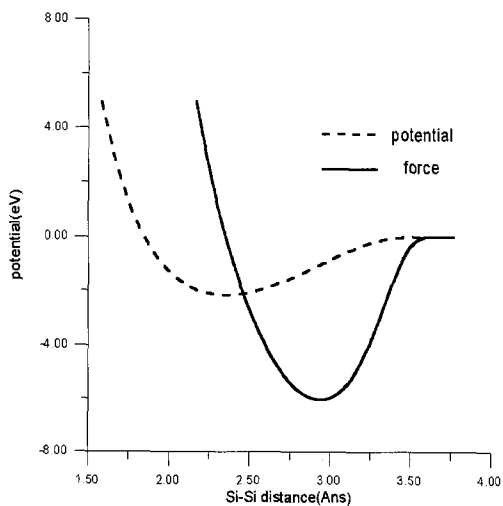
여기서,  $P_{ion}$ 은 이온이 실리콘 웨이퍼에 들어가는 순간의 에너지이고  $M_{ion}$ 은 이온의 원자량이다. 이온은  $5 \text{ eV}$  이하에서 정지하는 것으로 가정하였다.

그리고 계산 량을 줄이기 위하여 이온과 실리콘 사이에서 다중 상호작용(multiple interaction)을 하는 실리콘 원자들을 표로 만들어 이온은 일정한 시간동안 표로 만들어진 실리콘 원자들과만 반응하는 것으로 가정하였으며, MD 결공 형성에너지인  $3.64 \text{ eV}$ <sup>[18]</sup> 이하를 가지면서 결공 위치에서 원자 반지름 이내에 존재하는 원자들은 재결합을 하는 것으로 가정하였다.

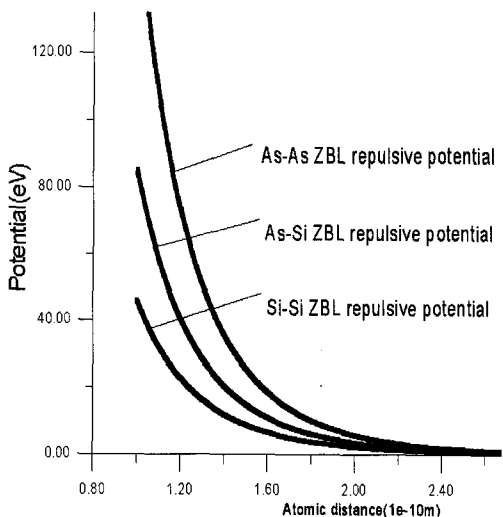
## IV. 시뮬레이션 결과 및 고찰

2장의 물리적인 조건과 3장의 알고리즘을 사용하여  $1 \text{ keV}$  Si과  $1 \text{ keV}$  As 이온 주입을 시뮬레이션 하였다. 그림 2에서는 Si 이온이 (100) 방향 격자 한가운

데로 채널링(Channeling) 이온 주입을 하였을 경우 이온의 궤적과 속도 감소를 시뮬레이션 하였다. BCA의 경우는 이러한 조건에서는 충돌이 발생하지 않으므로 이온은 아무런 방해도 받지 않고 시뮬레이션 영역을 벗어나게 된다. 하지만 MD방법을 사용하였을 경우 이온은 격자 원자들과 계속적인 상호작용을 하게 된다. 그림 2(b)와 같이 반발력과 인력으로 인하여 속도는 약간의 감소와 상승을 반복하면서 감소하게 된다.



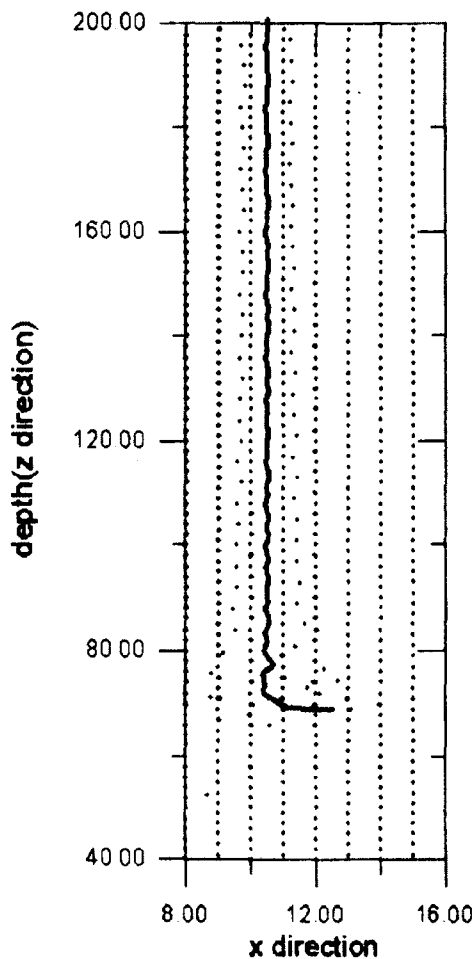
(a)



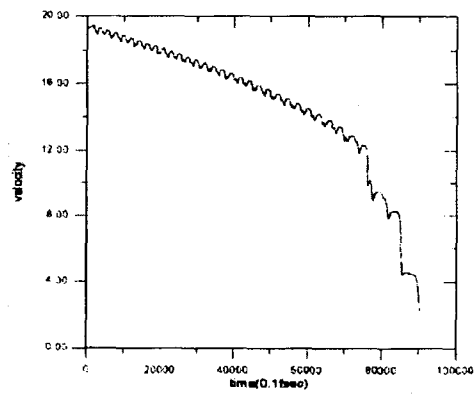
(b)

그림 1. (a) 본 논문에서 사용된 두 원자간 SW (b)본 논문에서 사용된 두 원자간 As-As, As-Si, Si-Si 사이의 ZBL

Fig. 1. (a) SW two-body potential and force, (b) As-As, As-Si, Si-Si ZBL potential.



(a)

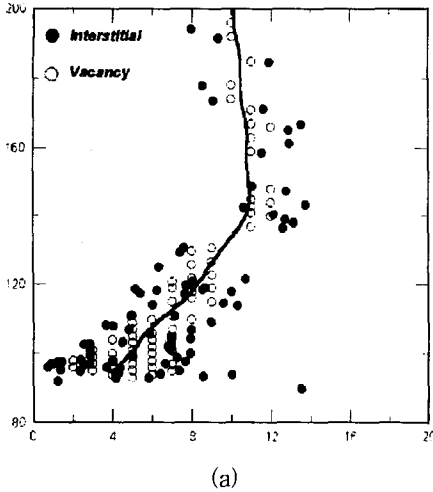


(b)

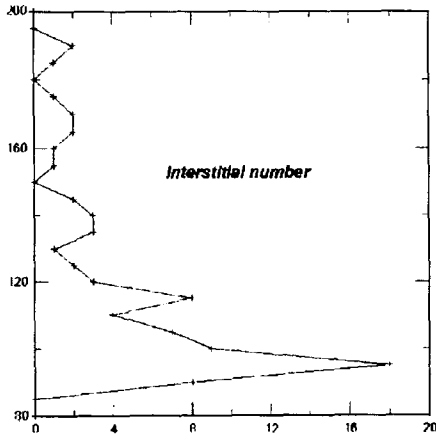
그림 2. (a) (100)채널링 방향으로 Si 1KeV 이온 주입한 경우 이온 궤적 (b) 시간에 따른 이온의 속도 변화

Fig. 2. (a) Ion trajectory after a 1keV Si implant into(100) channeling direction (b) ion velocity variation with time.

그림 3(a)에서는 As의 궤적과 vacancy와 interstitial과 recoil 원자에 대한 위치를 보여주고 있다.



(a)



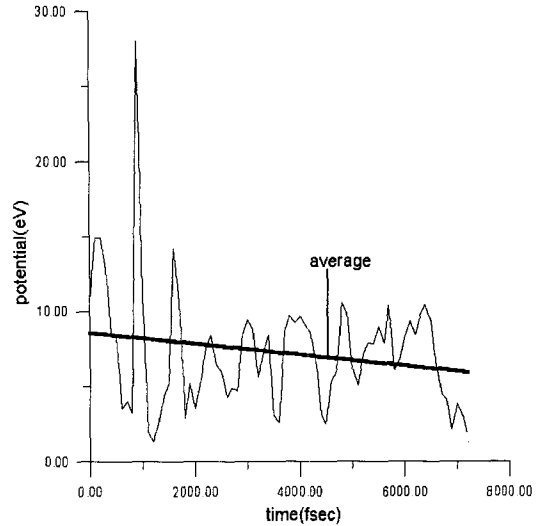
(b)

그림 3. (a) (100)채널링 방향으로 As 1KeV 이온 주입을 경우 이온의 궤적 및 틸새와 결공의 위치 ●은 틸새, ○은 결공을 나타낸다 (b) (100) 채널링 방향으로 As 1KeV 이온 주입을 경우 깊이방향에 따른 틸새의 개수

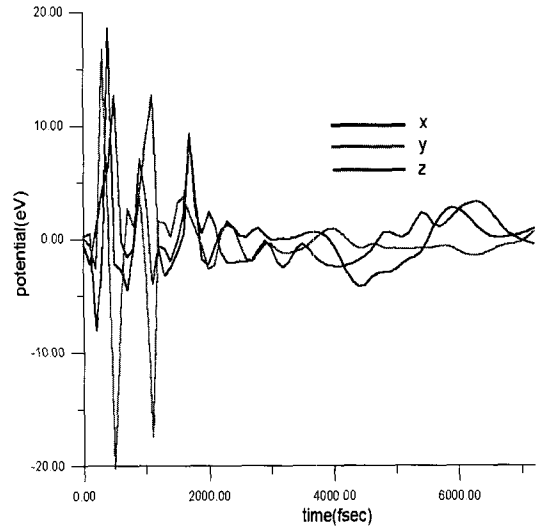
Fig. 3. (a) Ion trajectory and interstitial/vacancy positions after a 1keV As implant into (100) direction channeling, (b) interstitial number with depth direction after a 1keV As implant into (100) direction channeling.

이러한 이온 주입 시뮬레이션 결과 slowing-down 이 시뮬레이션 되었고 틸새와 결공의 위치를 찾을 수 있었다. 점 결합의 발생은 Frenkel pair모델을 가정하고 원자가 격자에서 떨어져서 결공 중심으로부터 원자 반지름 이내에 존재하지 않을 때 이를 결공이라 정

의하였으며, 이러한 격자에서 떨어져 나온 원자들을 틸새로 정의하였다. 만약 시뮬레이션 중에 틸새가 결공 위치에서 반지름 이내에 존재하게 되면 이때 재결합이 일어나는 것을 가정하였다. 이러한 가정에 따른 깊이 방향에 대한 틸새의 개수는 그림3 (c)과 같이 깊이 들어갈수록 많아졌다.



(a)



(b)

그림 4. (a) 300eV Si이온 주입 시 이온이 받는 총 에너지 (b) 이온이 x, y, z 방향에 대하여 받는 에너지

Fig. 4. (a) Total repulsive energy after 300eV Si ion implant, (b) Repulsive energy at x-, y-, z-direction, respectively.

그림 4는 300eV Si 이온 주입경우에 이온의 속도

와 시간당 이온이 실리콘으로부터 받는 에너지를 보여 주고 있다. 2 psec 정도까지 이온의 에너지에 의해서 운동을 하지만 2psec 이후에는 원자간의 multiple interaction에 의한 에너지로 운동을 하게 되어서 많은 산란으로 틱새가 많이 생겨났다. BCA는 2psec이후의 실리콘과의 반발력과 인력에 기인한 이온의 운동을 고려하지 않는다. 2psec이전에 발생한 틱새는 높은 에너지로 떨어져 나오기 때문에 recoiling이 발생할 수 있다.

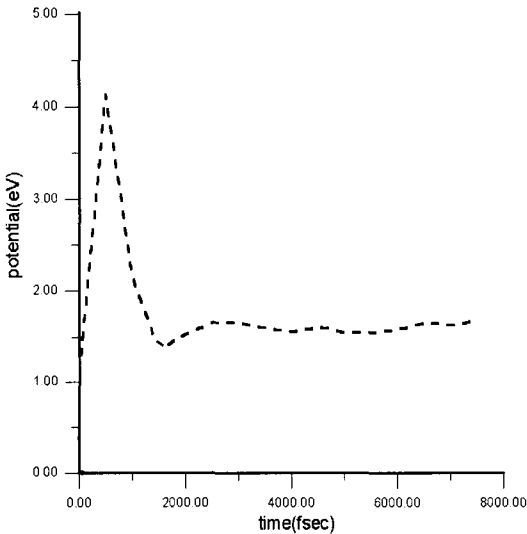


그림 5. 300eV Si 이온 주입 시 발생한 틱새의 시간에 따른 평균 에너지 변화

Fig. 5. Interstitial average energy variation with time occurred after a 300eV Si ion implant.

그림 6에서는 <100>에 대하여 10℃ 기울기로 주입된 이온 하나가 완전히 정지했을 때 다음 이온이 주입되었을 경우를 시뮬레이션한 결과와 동시에 여러 개의 이온이 주입되었을 경우를 비교하였다. 25개 이온이 동시에 웨이퍼로 주입된 경우가 하나의 이온이 25번 주입된 경우와 비교하여 깊이 방향에 대하여 이온들이 고르게 분포하고 있는 것으로 나타났다. 하나씩 이온 주입한 결과는 이전의 이온 주입에 의해 발생한 점 결함의 영향으로 산란이 많이 발생하여 깊이 들어가지 못하고 중간부분에 이온이 많이 모이는 현상을 나타내는 반면, 25개 이온이 동시에 주입된 경우에는 이온 주입된 이온들과 점 결함들의 인력과 반발력에 기인한 상호작용으로 인한 coupled-moving으로 이온들이 더 깊이 들어가는 것으로 나타났다. 이러한 cou-

pled-moving으로 인하여 동시에 이온 주입된 경우의 이온들이 운동하는 시간이 더 길게 나타났다.

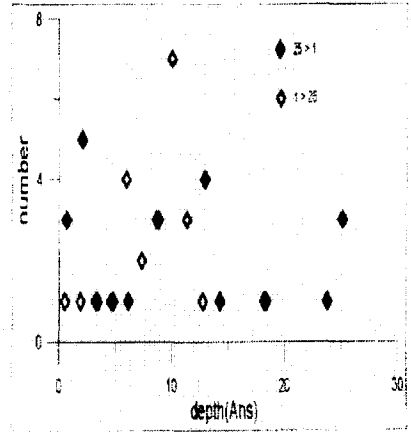
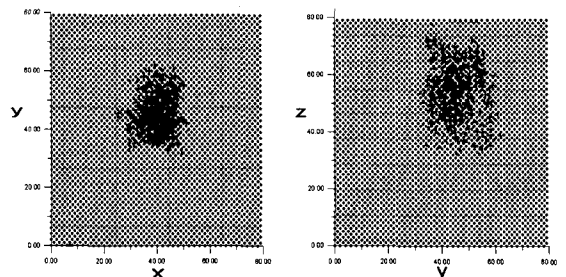


그림 6. coupled-moving 현상 25개 이온이 동시에 주입된 경우, 이온이 전체적으로 고르게 분포하고 있는 반면에 25개 이온이 하나씩 주입한 경우, 이온이 깊이 방향에 대하여 중간 부분에 많이 모이는 것을 볼 수 있다

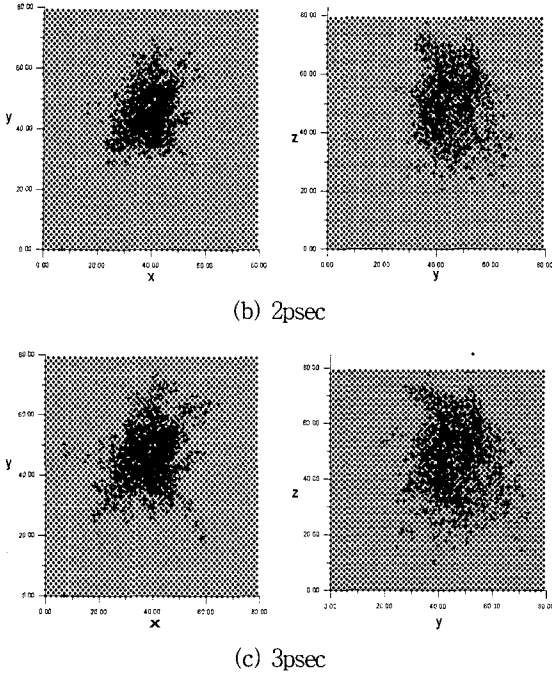
Fig. 6. Coupled-moving phenomenon. We observed that when 25 ions are implanted simultaneously, these are distributed uniformly, but we observed that when 25 ions are implanted one by one, filed up at center with depth direction.

또한 60개의 이온이 동시에 (100)방향으로 주입되었을 경우 시간에 따른 격자손상을 위에서 본 것과 옆에서 바라본 모양은 그림7과 같다. 이온과 점 결함 및 격자 원자들간의 상호작용으로 인하여 점 결함이 시간에 비례하여 증가하는 것을 볼 수 있다.

As를  $2.1 \times 10^{15}$  도즈에서 이온 주입한 결과 이전 이온 주입된 위치와 근접한 위치에 이온들이 떨어지게 되면 이때에 채널링(channeling)이 발생할 확률이 높은 것으로 시뮬레이션 결과 나타났다.



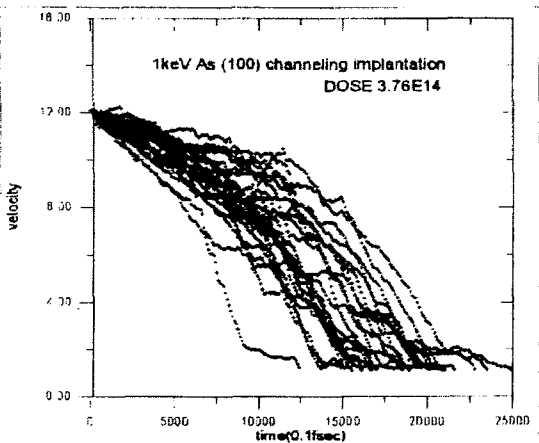
(a) 1psec



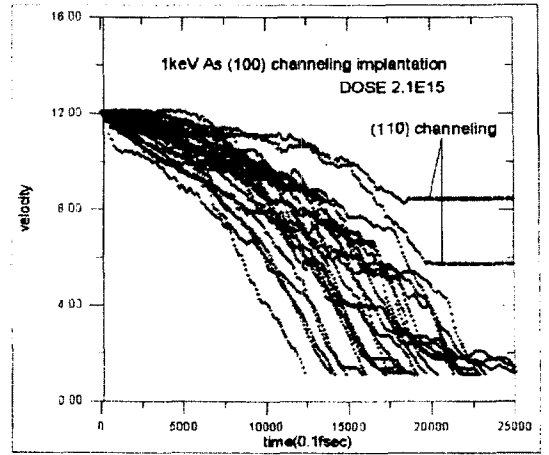
(b) 2psec  
(c) 3psec  
(top cross-section view) (side cross-section view)  
그림 7. 60개의 이온이 (100) 방향에 대하여 10° 기울기로 동시에 주입되었을 경우 (a) 1psec, (b) 2psec, (c) 3psec 일 때 위에서와 옆에서 바라본 점 결함 분포

Fig. 7. When 60 Si ions implant into (100) direction simultaneously at tilt 10°, the distributions of point defect in top and side view after elapsing (a) 1psec, (b) 2psec, (c) 3psec.(a)

이전에 주입된 이온으로 인하여 생겨난 결공 분포에 의하여 이온이 받는 반발력이 적어지게 됨으로, 이온의 속도 감소가 느리고 일어나며 채널링이 일어날 확률이 높아지게 된다.



(a)



(b)

그림 8. 도즈량이 다를 때 연속적으로 주입된 이온의 속도 감소 비교 (a)는 도즈가  $3.76 \times 10^{14}$  (b)는 도즈가  $2.1 \times 10^{15}$  도즈량에 높을수록 이온의 속도가 감소하는 정도가 늦어지고 채널링이 발생하는 경우가 많아진다

Fig. 8. Comparison of continuously implanting ion dose rates where the doses are not same. In case of (a) and (b), doses are  $3.76 \times 10^{14}$  and  $2.1 \times 10^{15}$  respectively. The higher dose, the slower ion velocity variation and the more possibility of occurring channeling.

특히 높은 도즈량에서 결공 분포가 표면 영역에 많이 발생하여 이온이 반발력을 적게 받게 되므로 이온 주입 초기에 속도의 감소가 적게 일어나고 1psec 이후에는 도즈량과 거의 무관하게 속도가 감소하였다. 채널링은 주로 (110)방향으로 발생하였다.  $3.73 \times 10^{14}$ 도즈에서는 채널링이 발생하지 않았으며 이온 속도 감소 또한  $2.1 \times 10^{15}$ 에서 보다 빨리 일어났다(그림 8).

TED현상은 이온 주입 시 발생한 점 결함들과 이온들이 열처리과정 동안에 받게 되는 열에너지와 원자간의 반발력에 의하여 발생한다. 그러므로 이러한 점 결함들의 분포와 구조를 이해하는 것은 중요하다.

본 논문에서 시뮬레이션한 그림 1의 경우에 대한 결공과 틸새의 분포에 대한  $g(r)$ 은 그림 9와 같다. 틸새는 격자에서 떨어져 나와서 주로 떨어져 나온 격자 주변에 존재하면서 cluster을 형성하는 경우가 많고 사면체 중심(Tetrahedron interstitial)에 존재하는 경우가 많은 반면에, 결공은 독립적으로 존재하는 경우가 많고 특히 하나의 격자의 원자를 포함하는 결공을 형성하는 경우가 많은 것으로 나타났다. cluster로 존

재하게 되는 틱새는 열처리동안에 에너지를 받아서 운동하게 되고 이러한 운동은 불순물과 결합되어서 coupled-moving을 일으키게 되어서 TED가 발생한다. 이러한 틱새는 어닐링 동안에 {311} 결합과 dislocation loop을 형성하여 TED을 발생시키는 것으로 알려져 있다<sup>[24,25]</sup>

생하는 점 결함의 위치를. 원자간 전위 SW, ZBL을 사용하여 계산하였다. 이를 이용하여 실리콘 내부에서 일어나는 현상에 대하여 시뮬레이션 하였고, 이온 주입 시 원자간의 다중 상호작용(multiple interaction)의 영향이 이온의 궤적과 에너지 감소에 영향을 미치고 점 결함의 발생과 분포에 미치는 영향을 살펴보았다. 또한 이온 주입 시 발생한 점 결함의 분포와 다양한 현상을 살펴보았다.

이온이 주입될 경우 이온이 실리콘 내부에 있게 되면 경우 이온과 그 주변의 실리콘 원자들이 상호 작용을 일으키어 이온이 계속적인 힘을 받게 되기 때문에 채널링 영역에 들어가게 되더라도 이온의 반발력과 인력을 받기 때문에 이온의 속도는 변하게 되어서 BCA에서보다 더욱 현실적인 이온 주입이 시뮬레이션될 수 있었다. 이온 주입에 의해서 발생한 점 결함은 이온과 상호작용을 하게 되어서 이온과 틱새의 coupled-moving이 발생하는 것을 볼 수 있었으며, 또한 이온 주입에 의해서 발생된 틱새는 주로 덩어리를 형성하게 되는 것을  $g(r)$ 을 이용하여 살펴보았다. 이러한 틱새 덩어리는 이온 주입 후속 공정인 열처리 공정 동안에 TED를 발생시키게 될 것을 알 수 있었다.

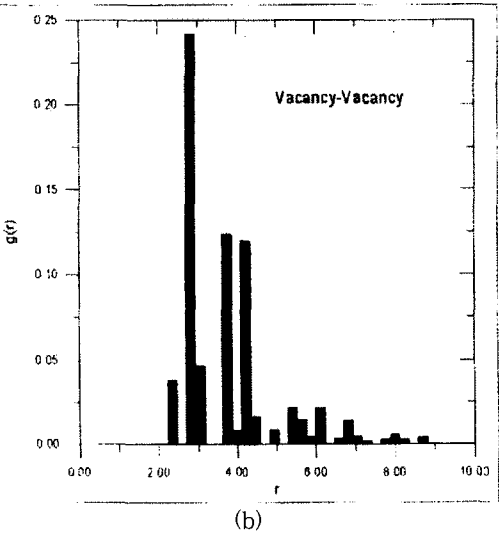
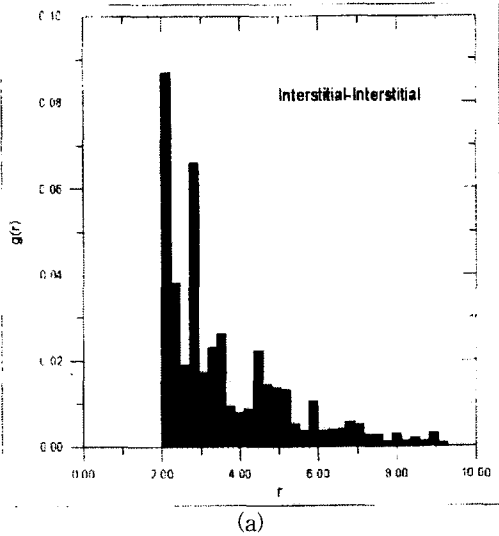


그림 9. 그림 1의 이온 주입 후 I-I (a), V-V (b) 사이의 Radial Correlation Function( $g(r)$ )  
 Fig. 9. After ion implantation, (a) I-I radial correlation function, (b) V-V radial correlation function.

V. 결론

물리적인 토대 위에 이온 주입과 이온 주입 시 발

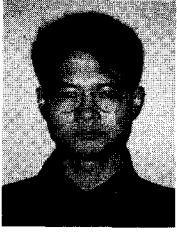
참 고 문 헌

- [ 1 ] P.B. Griffin and J.D. Plummer, "Physical Modeling of Transient Enhanced Diffusion in Silicon", Process Physics and Modeling in Semiconductor Technology, pp. 101, 1996.
- [ 2 ] J.D. Plummer, P.B. Griffin, "Challenges for predictive process simulation in sub 0.1  $\mu$  m silicon devices". Nucl. Inst. Meth. Phys. B, 102, pp.160, 1995. (참고: "Atomic Level Modeling", <http://aramics.stanford.edu/comproto/reshigh/atomics/Fall94.html>)
- [ 3 ] 손명식, 이준하, 송영진, 황호정, "<100>방향 실리콘 단결정에서의 저 에너지 붕소 이온 주입 공정에 대한 3차원 몬테 카를로 시뮬레이션 및 마스크 효과", 전자 공학회 논문지, 제32권 A편, 제8호, pp. 94-106, 1995
- [ 4 ] O.S. Oen, D.K. Holmes, and M.T. Robinson, J. Appl. Phys. 34, pp. 302, 1963.
- [ 5 ] J.F. Ziegler, J.P. Biersack and U. Littmark, "The stopping and range of Ions in



- Solids”, vol. 1, Ed. Ziegler, Pergamon, New York, 1985.
- [ 6 ] K. Nordlund, “Molecular dynamics simulation of ion ranges in the 1-100keV energy range”, *Mat. Sci.* 3, pp. 448, 1995.
- [ 7 ] M. Posselt and K.H. Heining, “Comparison of BC and MD simulations of low-energy ion implantation,” *Nucl. Inst. Meth. Phys. B*, 102, pp. 236, 1995.
- [ 8 ] T. Diaz de la Rubia and M. J. Caturla, “Atomics scale simulations of arsenics ion implantation and annealing in silicon”, *Process Physics and Modeling in Semiconductor Technology*, pp. 429, 1996.
- [ 9 ] K.Nordlund, R.S. Averbach and T Diaz de la Rubia, “Effect of Atomic Bonding on Defect Production in Collision Cascades,” *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* 1997.
- [ 10 ] Lin Hong Li and J.E. Lowtjer, “Lattice relaxation at vacancy aggregation in diamond”, *Phys. Rev. B*, vol. 53, no. 7, pp. 11277, 1996.
- [ 11 ] K. Nordlund and A. Kuronen, “Molecular dynamics simulation of ion ranges at keV energies”, *Nucl. Instr. Meth., Phys. B*, 1995.
- [ 12 ] P.B. Rasband, Paulette Calnsy and Katy Sheterom, “Structures and Stabilities of Boron Clusters in Silicon”, *Process Physics and Modeling in Semiconductor Technology*, pp. 262, 1996.
- [ 13 ] T. Diaz de la Rubia, 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, 1995.
- [ 14 ] M.R. Zachariah, M.J. carrier, and Estela Blaisten-Barojas, “Properties of Silicon Nano-particles: A Molecular Dynamics Study,” *J. Phys. Chem.* 100, pp. 14856, 1996.
- [ 15 ] K.Hahn and J. Karger, “Molecular Dynamics Simulation of Single-File Systems,” *J. Phys. Chem.* 100, pp. 316, 1996.
- [ 16 ] M. Posselt and B. Schmidt, “Modeling of Damage Accumulation during Ion Implantation into Single-Crystalline Semiconductor”, *Process Physics and Modeling in Semiconductor Technology*, pp. 453, 1996.
- [ 17 ] K. Gartner, et. al., “Round robin computer simulation of ion transmission through crystalline layers,” *Nucl. Inst. Meth. Phys. B*, 102, pp. 183, 1995.
- [ 18 ] G.H. Gilmer, T.Diaz de la Rubia, D.M. Stock, and M. Jaraiz, “Diffusion and interactions of point defects in silicon: molecular dynamics simulations,” *Nucl. Inst. Meth. Phys. B*, 102, pp. 247, 1995.
- [ 19 ] F.H. Stillinger and T.A. Weber, “Computer simulation of local order in condensed phases of silicon”, *Phys. Rev. B*. vol. 31, num 8, 1985.
- [ 20 ] J.F. Ziegler, “Handbook of Ion Implantation Technology,” *NORHT-HOOLAND*, pp. 93, 1992.
- [ 21 ] X.G. Gong, “Stability and electronic properties of nanoscale silicon clusters,” *Phys. Rev. B*. vol 52, no 20, pp. 14677, 1995.
- [ 22 ] J.M. Haile, “Molecular Dynamics Simulation”, John Wiley & Sons, inc. 1992.
- [ 23 ] M.R. Current, R. Mathur, and L.A. Larson, “Process simulation challenges for ULSI devices: A user perspective”, *Nucl. Inst. Meth. Phys. B*, 102, pp. 198, 1995.
- [ 24 ] Alp H. Gencer and Scott T. Dunham, “Modeling of Transient Enhanced Diffusion based on Evolution of {311} Defects”, *Process Physics and Modeling in Semiconductor Technology*, pp. 155, 1996.
- [ 25 ] Samir Chaudhry and Mark E. Law, “Effect of Stress on Point and Extended Defects in Silicon”, *Process Physics and Modeling in Semiconductor Technology*, pp. 408, 1996.
- [ 26 ] D.Shaw, “Atomic Diffusion in Semiconductors”, Plenum Press, 1973.

— 저 자 소 개 —



姜 正 遠(正會員)

1973년 3월 6일생. 1995년 2월 중앙대학교 전자공학과 졸업. 1997년 8월 중앙대 대학원 전자공학과 석사. 1997년 9월 ~ 현재 중앙대학교 대학원 전자공학과 박사과정. 관심분야는 반도체 소자 및 공정 물리, 분자

동역학 시뮬레이션 등임



孫 明 植(正會員)

1992년 2월 중앙대학교 전자공학과 졸업. 1995년 2월 중앙대 대학원 전자공학과 석사. 1995년 3월 ~ 현재 중앙대 대학원 전자공학과 박사과정. 관심분야는 반도체 소자 및 공정 물리, 이온 주입 모델링 및 시뮬레이션 등임

黃 好 正(正會員) 第 26卷 第 7號 參照

현재 중앙대학교 전자공학과 교수