

# 3차원 몬테 카를로 이온 주입 공정 모델링 및 시뮬레이션: 효율적인 가상 궤적 발생 알고리즘

## (Three-Dimensional Monte Carlo Modeling and Simulation of Ion Implantation Process: an Efficient Virtual Trajectory Split Approach)

孫明植\*, 黃好正\*

(Myung-Sik Son and Ho-Jung Hwang)

### 요 약

각각의 시뮬레이션 입자 궤적을 추적하여 입자들의 통계적 분포를 얻는 물리적 토대의 몬테 카를로 이온 주입 시뮬레이션의 단점인 과도한 컴퓨터 시뮬레이션 시간을 단축시키고 3차원 이온 주입 영역에서의 도펀트(dopant) 및 점결함(point defect) 분포에 대한 통계적 잡음 분포를 최소화하기 위한 효율적인 3차원 가상 궤적 발생 알고리즘(3-dimensional virtual trajectory split algorithm)을 개발하였다. 본 알고리즘은 이미 개발된 물리적 토대의 TRICSI 몬테 카를로 시뮬레이터의 격자 손상 모델(damage accumulation model)과 결합하여 소자 시뮬레이션 및 후속 공정인 확산 공정 모델링을 위해 필요한 다양한 이온 주입 공정 조건에서의 3차원 시뮬레이션을 성공적으로 수행하였다. 수행 시간은 가상 궤적 알고리즘을 사용하지 않은 경우에 3차원 시뮬레이션인 경우 10배 이상의 수행시간 감소를 확인할 수 있었다. 본 논문에서 제안한 모델은 3차원 이온 주입 영역에서는 최대 농도 값에 비해 상대적으로 농도( $10^3 \sim 10^8$ 배)가 낮은 측면 및 깊이 방향으로의 통계적 잡음 영역을 최소화할 수 있으며, 1차원 시뮬레이션만을 하는 경우에는 1,000개의 이온을 사용하고 2개의 분리 가짓수를 사용하여 최적화된 1차원 도핑(doping) 및 점결함 분포를 얻을 수 있었다.

### Abstract

In our paper is reported a new 3D(dimensional) trajectory split approach with greatly improved efficiency for the Monte Carlo simulation of the 3D profiles of implanted ion and point defect concentrations in single-crystal silicon. This approach has been successfully implemented in our TRICSI Monte Carlo code. Combined with the previously developed model for damage accumulation in our TRICSI code, this model allows physically based dynamic simulation of 3D profiles over an extremely wide range of implant conditions required for the accurate device simulation and the subsequent process simulation such as diffusion modeling and simulation. A typical time saving of over 10 times has been achieved for 3D simulations. Our method ensures much better representations with 3 to 8 orders of magnitudes smaller than the maximum in peripheral noise region around the implanted area. For 1-D simulation, the optimized condition for trajectory split has set to 3,000 pseudoparticles with 2 split branches.

\* 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 Eng., Chung-Ang University)  
接受日字:1997年10月20日, 수정완료일:1998年2月26日

## I. 서론

이온 주입 및 점결함 분포에 대한 정확한 정보는 반도체 소자 제작 공정의 최적화를 위한 공정 제어 뿐만 아니라 반도체 소자 개발 공정이나 정확한 소자 시뮬레이션, 확산 공정과 같은 후 처리 공정에서의 모델링 및 시뮬레이션에 필수적인 요인이다. 반도체 소자 개발의 극단적인 소형화 추세에 있어서 성공적인 소자 개발을 앞당기기 위해서는 정밀하고 정확하게 제어된 이온 주입 분포가 필수적으로 요구된다. 이러한 추세에 있어서는 이온 주입 공정에서의 채널링(channeling) 현상을 포함하는 정확한 이온 주입 분포에 대한 측정을 요구하게 된다. 그러나, 비교적 정확하다는 기존의 1차원 도핑 분포에 대한 SIMS 및 SRP 측정인 경우에도  $10^{15}$  [ions/cm<sup>3</sup>] 이하의 농도에서는 측정 효율이 떨어지는 단점을 가지며, 2차원 측정인 XTEM 측정법도 단순히 2차원 농도 분포의 외곽 형상만을 측정할 수 있는 게 현재의 측정 기술이다. 또한, 현재로서는 100Å 정도의 해상도를 갖는 3차원 농도 측정 및 점결함 분포에 대한 측정은 어려운 실정이다. 이러한 소자 제작 환경에서 단결정 실리콘에 이온 주입된 깊이 및 측면 채널링 영역에 대한 정확한 분포 정보 없이는 채널링 분포가 소자에 미치는 영향들을 분석 제어하기가 용이하지 않으리라 여겨진다.

이러한 요구를 충족시키기 위한 하나의 대안이 몬테 카를로 시뮬레이션이다. 몬테 카를로 시뮬레이션은 물리적 토대의 모델링을 통해 다양한 이온 주입 공정 조건에서도 비교적 정확한 이온 주입 분포를 예측할 수 있으며, 이온 분포 뿐만 아니라 동시에 이온 주입에 의해 발생하는 결함(damage) 분포에 대한 정보를 제공할 수 있다는 장점을 갖는다. 이러한 이유에서 많은 몬테 카를로 시뮬레이터들<sup>[1-7]</sup>이 정확한 이온 주입 분포를 예측하기 위해 개발되었으며, 본 연구실에서도 자체적으로 TRICSI(Transport Ions into Crystal Silicon)<sup>[8-12]</sup> 몬테 카를로 시뮬레이터를 개발하여 왔다.

단결정 실리콘 구조를 고려한 몬테 카를로 이온 주입 시뮬레이터의 사용에 있어서 가장 큰 제한은 과도한 컴퓨터 계산 시간이다. 일반적으로 이온 주입된 채널링 분포를 예측하기 위해서는 단결정 실리콘의 3차원 구조를 고려한 충돌 탐색 알고리즘이 필요하며, 각 충돌마다 핵 충돌에 의한 에너지 손실과 이온 비행 궤

적상에서 발생하게 되는 전자 충돌에 의한 에너지 손실들을 계산하여야 한다. 또한, 이온 주입 도즈(dose) 량에 따른 정확한 분포를 예측하기 위해서는 축적되는 격자 손상 정도를 동시에 고려해야만 한다. 이러한 한 이온에 대한 계산과정이 시뮬레이션 이온 수 및 이온 주입되는 에너지에 비해 과도한 컴퓨터 수행 시간을 요구하게 된다. 또한, 그림 3(a-b)에서 보는 바와 같이 1차원 시뮬레이션인 경우에도 1차원 채널링 꼬리 영역을 시뮬레이션하기 위해서는 기존의 시뮬레이션 입자 수(보통 5,000~10,000개 정도)를 가지고서는 분포의 채널링 꼬리 부분을 충분히 시뮬레이션 할 수가 없게 된다. 우리의 경험에 의하면 적어도 1,000,000개 이상의 시뮬레이션 입자(pseudoparticle)가 필요하게 된다. 더욱이 이온 주입되는 구조에 따른 깊이 및 측면 분포를 예측하기 위한 3차원 시뮬레이션의 경우에는 이보다 넓은 3차원 영역에서의 통계적 정확성을 유지하기 위해 기하급수적인 시뮬레이션 입자를 요구하게 된다. 그러나 3차원 영역으로의 확장은 사용되는 알고리즘에 따라 많은 메모리를 요구하게 되는 데, 이는 시뮬레이션 입자에 따른 수행 시간의 효율성과 더불어 3차원으로의 확장이 용이하지 않음을 반증한다<sup>[1-7]</sup>. 또한, 3차원 구조에서 시뮬레이션 하더라도 그 결과는 입자수의 부족으로 인해 2차원의 투영 농도 분포나 작은 영역에 한정될 수밖에 없었다<sup>[1-7]</sup>. 보통 1차원 시뮬레이션 구조에서는 작은 영역(실리콘 단위 영역:  $5.43095 \times 5.43095 \text{Å}^2$ )에 5,000에서 10,000개 정도의 시뮬레이션 입자를 사용하는 경우가 보통이다. 이때, 표현되는 깊이에 따른 1차원 농도 분포는 이온 주입 공정 조건에 따라 다르긴 하지만 시뮬레이션 입자 1개가 나타내는 농도와 최대 농도 값과의 차이는  $10^3$  정도 밖에 되지 않아 높은 도즈(high dose)에서의 1차원 이온 주입 농도 분포인 경우에는 최대 농도 값에 비해 작은( $10^3 \sim 10^6$ 배) 농도 영역인 깊은 채널 꼬리(deep channeling tail) 영역을 충분히 시뮬레이션할 수가 없었다. 그러나, 이러한 1차원 시뮬레이션의 문제를 해결한 가상 궤적 발생 알고리즘(trjectory split method or rare event approach)<sup>[13-14]</sup>과 보다 빠른 수행 시간을 갖는 컴퓨터의 등장으로 몬테 카를로 시뮬레이션이 한층 3차원으로 확장 적용될 가능성을 높여 주었다.

그러나 문헌 [13]의 시뮬레이터는 1차원 문제에만 적용 발표되었으며, 메모리의 한계성을 갖는다<sup>[5]</sup>.

문헌 [14]는 1차원 및 2차원 시뮬레이션에 적용 발표되었으나, 계산 효율을 위해 점결함 분포에 대한 영향을 해석적인 Kinchin-Pease 식<sup>[15]</sup>을 사용함으로써 점결함 분포에 대한 정확성이 결여되고 있다. 일반적으로 Kinchin-Pease 식에 의한 결함 분포는 단결정 실리콘 구조에서는 RBS 측정 결함 농도에 비해 높게 계산되는 것으로 알려져 있으며, 이 식은 웨이퍼 온도에 의해 상온 이온 주입 시에도 발생하게 되는 틸새-결공(vacancy-interstitial) 간의 재결합 효과(recombination effect) 및 단결정 실리콘 구조를 고려하지 않은 식이므로 보통 각 이온에 대해 적절한 계수 값들을 사용하여 이러한 문제를 보완 시뮬레이션하는 것이 보통의 방법이다<sup>[1,2,6,7,14]</sup>.

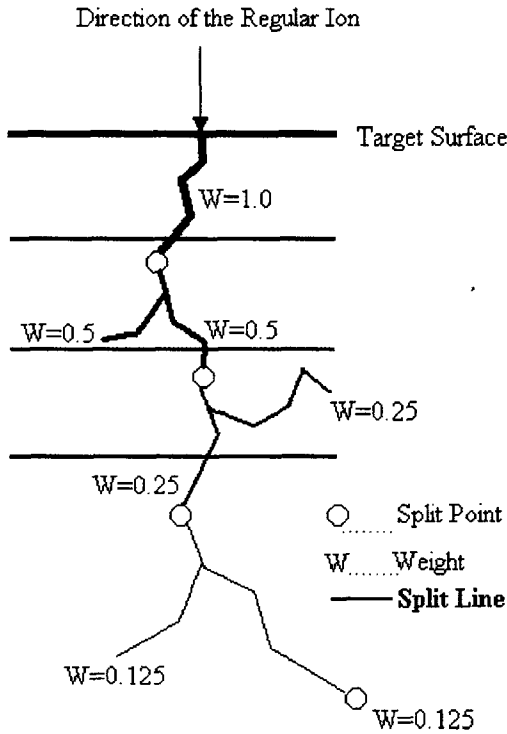


그림 1. 가상적인 이온 궤적 가지 및 각 분리 궤적의 가중치에 대한 개념도  
 Fig. 1. The topological concept of the virtual trajectory split branches and their weighting values.

또한 이러한 방법들은 효율적이긴 하지만 점결함(point defect)에 대한 기본 가정을 깊이 따라 틸새(interstitial)와 결공(vacancy)이 같다는 가정하에서 시뮬레이션하게 된다. 그러나 물리적인 고찰 및 실험을 통해서

는 이온 주입되는 이온이 목표 원자(target atom)와 질량이 같거나 더 무거운 경우 실리콘 벌크(bulk) 영역으로 직진하려는 운동량 전이에 의해 반동 원자는 더 깊은 실리콘 영역으로 반동 되어 들어갈 수가 있다<sup>[15-19]</sup>. 따라서 이들의 분포는 최대 이온 농도를 전후로 하여 다르게 나타난다<sup>[1, 4, 12, 17, 19]</sup>.

따라서 문헌에서 제안된 그림 1에 나타난 1차원 가상 궤적 방법<sup>[13]</sup>을 위에서 언급한 점결함 분포를 고려하여 효율적으로 3차원으로 확장 적용하고, 정확한 점결함 분포 및 이온 주입 분포를 동시에 얻기 위해 이미 개발 제안된 역동 손상 모델(full-dynamic damage model)<sup>[12]</sup>을 결합 적용함으로써 이온 주입 분포 뿐만 아니라 점결함 분포에 대한 3차원 잡음 영역을 최소화 시킬 수 있는 B, BF<sub>2</sub>, As, P이온에 대한 결함 효과에 대한 일관성과 효율성 및 정확성을 동시에 고려한 컴퓨터 수행 알고리즘을 개발 적용할 수 있었다<sup>[20,21,22]</sup>.

본 논문에서는 효율적으로 가상 궤적을 발생시켜 3차원 잡음 영역에서의 최종 시뮬레이션 입자 수를 증가시키고, 또한 이들의 궤적에 격자 손상 영향을 고려한 3차원 역동 손상 시뮬레이션(dynamic simulation for damage accumulation)<sup>[12]</sup>을 위한 가상 궤적 발생 알고리즘에 대해서 다음과 같은 방법을 제안 적용하였다.

## II. 3차원 가상 궤적 발생 알고리즘

단결정 구조의 물질인 실리콘에서 이온 궤적에 대해 가상 분리 궤적을 발생시킬 수 있는 가장 큰 물리적 근거 및 이점은 두 가지로 요약<sup>[13-14]</sup>될 수 있다. 첫 번째는 몬테 카를로 시뮬레이션이 적은 수의 대표 입자를 통해 많은 이온 주입 분포를 시뮬레이션하게 되므로 한 입자가 갖는 대표 입자 가중치<sup>[12]</sup>에 의한 잡음 오류가 증가된다는 사실에 기인한다. 이들의 가중치를 줄이기 위해서는 더 많은 시뮬레이션 입자가 필요하나, 이 방법은 컴퓨터 수행 시간의 증가라는 비현실적인 방법으로 적절한 분리 조건을 선택하여 이들의 대표 입자 가중치를 분리시켜 가중치가 클 때 나타날 수 있는 통계적 잡음 분포를 효율적으로 줄일 수 있다는 점이다. 두 번째는 적절한 분리 조건을 선택하여 궤적을 분리시키더라도 똑같은 진행 방향을 여러

번 사용하여 시뮬레이션 함으로서 수행 시간을 획기적으로 감소시킬 수 있다는 이점을 갖는다. 이에 대한 근거는 상온 이온 주입시 웨이퍼 자체 온도에 의해 열적 진동(thermal vibration)을 고려함으로써 가능하다. 발표된 문헌들의 경우 대부분 목표 실리콘 온도(T) 및 Debye 온도( $T_D$ ) 변수에 의해 결정되는 Debye 모델<sup>[23]</sup>을 사용하여 이를 고려하고 있다<sup>[1-12]</sup>. 이들 각 모델의 차이는 사용하는 실리콘과 이온간의 상호 전위(interatomic potential) 모델에 따라 실리콘에 대한 Debye 온도를 450 ~ 695 °K [ Kelvin ] 사이에서 설정하고 있다는 데 있다<sup>[1-12]</sup>. 본 모델에서는 Debye 온도는 450<sup>[24]</sup>로 설정하였다. 이때, 실리콘 웨이퍼 온도는 300 °K로 설정하였고, Debye 모델에 의해 계산된 평균 진동 폭( $X_{rms}$ )은 발표 문헌<sup>[24]</sup>에서와 같이 0.090Å으로 계산되었다<sup>[24]</sup>. 본 논문의 3차원 모델에서는 각 축에 대해 가우시안 분포(Gaussian distribution)를 이루는 난수  $R_n$  을 발생<sup>[25]</sup>시켜 각 축에 대한 결정식 (1)을 통해 이상적인 실리콘 위치로부터의 실리콘 이탈 위치를 가우시안 분포를 이루도록 결정하였고, 이 위치로부터 충돌 변수(impact parameter) 및 산란간 거리(flight-path length)를 계산하였다<sup>[8]</sup>.

$$\begin{aligned}
 x &= x_{ideal} + R_n \cdot X_{rms} \\
 y &= y_{ideal} + R_n \cdot X_{rms} \\
 z &= z_{ideal} + R_n \cdot X_{rms}
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

여기서 3차원 좌표점 ( $X_{ideal}$ ,  $Y_{ideal}$ ,  $Z_{ideal}$ )은 이상적인 격자 위치이며 격자 진동 폭과 가우시안 분포를 이루는 난수에 의해 충돌시의 위치 ( $x$ ,  $y$ ,  $z$ )가 결정된다.

따라서, 분리된 각 이온 궤적에 대해 똑같은 진행 방향을 여러 번 사용하더라도 다음 충돌의 실리콘 위치가 이상적인 위치에서 열적 진동 폭 내에서 각각 다른 충돌 위치를 나타낼 수 있으므로 다음 충돌의 진행 방향은 달라진다. 따라서 분리된 이들 각 궤적의 정지 위치는 보다 많은 통계적 분포를 나타내게 된다<sup>[13-14]</sup>.

그림 2는 Boron 이온을 에너지 5 keV, 도즈는  $2 \times 10^{16}$  [ ions/cm<sup>2</sup> ] 에서 수직 입사시의 공정 조건에서 가상 궤적 알고리즘과 완전 역동 손상 모델을 적용한 후의 시뮬레이션 결과이다. 한 개의 시뮬레이션 입자(simulated pseudoparticle)가 분리될 때의 분리 가지수(number of split branches)는 3개로 설정되었고, 초기 이온 주입 시뮬레이션 수는 10,000개였다.

최종 3차원 분포에서 시뮬레이션 구조의 반(마스크 오픈 영역의 정 중앙 점을 중심으로 한쪽 채적)을 절단하였을 때의 절단된 표면에 나타나는 불순물 농도를 색상으로 표현한 시뮬레이션 결과이다. 이때, 분리되어 정지한 최종 생성 입자 수는 대략 1,000,000개 정도였다. 1,000,000개의 시뮬레이션 입자를 가상 궤적 발생 알고리즘을 사용하지 않고 위에서 적용한 공정 조건에서 10,000개 수행 시간(36분) 기준으로 대략 100배 이상의 시간(3600분)이 소요되므로 비효율적이다. 여기서, 실리콘 벌크(bulk) 쪽의 검은 부분은 대략  $1 \times 10^{15}$  [ ions/cm<sup>3</sup> ] 농도 정도이고 표면 근처의 가장 붉은 부분은  $1 \times 10^{23}$  [ ions/cm<sup>3</sup> ] 농도 범위를 나타내고 있다. 따라서, 3차원 농도 분포에 있어서 최대 농도에 비해  $10^8$ 배의 농도 차이를 성공적으로 시뮬레이션할 수가 있었다. 수행 시간은 Pentium-Pro 200 MHz PC에서 8시간 걸렸다.

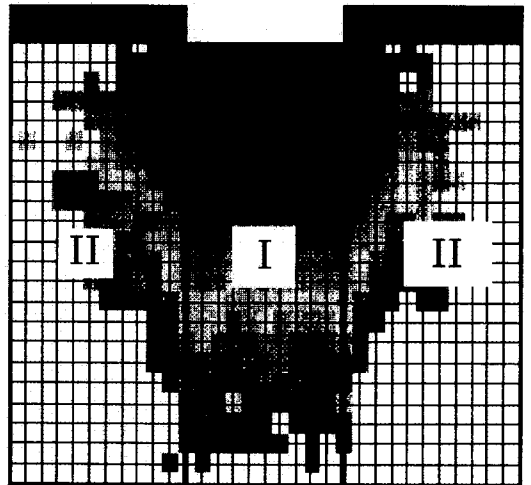


그림 2. 3차원 가상 궤적 발생 법을 설명하기 위한 절단된 1/2 단면에서의 이온 주입된 불순물 농도 분포도. 여기서, 각 색상은 이온 주입된 불순물 농도 분포를 나타내며, I 및 II는 굵은 실선으로 구분된 영역을 나타낸다.

Fig. 2. The concentration profile of implanted impurity on the 1/2 section surface for the description of the trajectory split approach to the 3-D simulations, where each colors represents the impurity concentration and I and II represents regions which are distinguished by thick solid lines between them.

그림 2에서 보는 바와 같이 I 영역과 오픈 마스크 측면 영역인 Y, Z축 각 방향으로의 II 영역에 대해 우

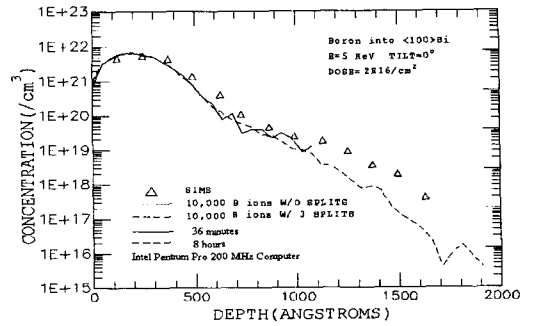
선 깊이 방향으로의 1차원 분리 조건만을 고려한다. 분리되기 전 시뮬레이션 이온의 가중치 W를 1로 가정하면, 분리된 각 이온은 분리 가지 수에 따른 새로운 가중치  $W (= 1 / \text{분리가지수})$ 를 갖게 되고, 깊이 방향으로 1차원 잠음 영역(깊은 꼬리 부분의 채널링 영역)을 최소화 할 수 있도록 한다. 이때, 분리선들(split lines)은 다음 (2) 식으로 결정되는  $R_{max}$  [Å] (주입된 이온이 핵과의 충돌 없이 진행된다는 가정하의 최대 거리)의 10% 거리를 사용하여 구한 거리에 분리 계수(SplitFactor)를 곱한 형태의 (3) 식의 값으로 결정된 이온 주입 되는 깊이 방향으로 등간격(SplitDistance)으로 설정해 놓은 10개의 분리선이다. 분리 계수(SplitFactor)를 설정한 이유는 높은 도즈(예를 들면  $1 \times 10^{16}$  [ions/cm<sup>3</sup>]) 도즈량의 이온 주입 시뮬레이션을 수행하는 경우에는 초기 10% 정도의 시뮬레이션 입자가  $1 \times 10^{15}$  [ions/cm<sup>3</sup>]의 도즈량을 시뮬레이션 해야 하므로 초기 10%의 이온이 충분히 분리되어 깊은 꼬리 부분의 채널링 현상을 시뮬레이션 할 수 있게 하고, 사용자가 쉽게 가상 궤적 발생 정도를 제어할 수 있도록 하기 위해서다. 처음 10%의 입자는 (2) 식에서 구한 10%의  $R_{max}$ 에 분리 계수를 곱한 (3) 식으로 결정한다. 최적화를 위한 10%에 대한 분리 계수는 TRICSI 시뮬레이터에서 높은 이온 주입 에너지 범위 및 넓은 도즈 범위를 동시에 고려하였을 때 1차원 시뮬레이션 최적 조건이라 여겨지는 2개의 분리 가지 수에 3,000개 시뮬레이션 이온을 사용하는 경우에 설정된 분리 계수 1.5가 가장 효율적인 1차원 농도 분포를 예측함을 확인하였다. 따라서, 초기 10% 이온에 대해 이온 진행 방향으로 첫 분리선으로부터 N개의 분리선이 등간격으로 분포하게 되어 깊이 방향으로 N+1개의 부영역(stage)이 존재하도록 설정하였다.

시뮬레이션 결과는 그림 3(b)의 1차원 결과는 도즈에 따라 각각 5개 및 10개의 분리선을 사용하여 시뮬레이션하였다.

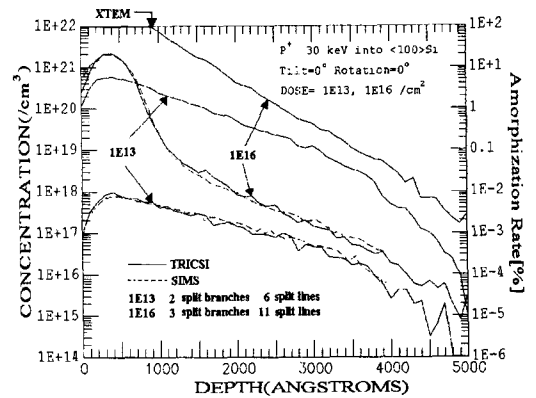
$$R_{max} = (E_0 / SEE) \quad (2)$$

$$\text{SplitDistance} = R_{max} \times 0.1 \times \text{SplitFactor} \quad (3)$$

여기서,  $E_0$ 는 초기 이온의 입사 에너지이며, SEE [eV/Å]는 전자들과의 충돌에 의해 거리 당 잃게 되는 전자 손실 에너지이다.



(a) Boron range profile implanted at energy 5 keV, dose  $2 \times 10^{16}$  ions/cm<sup>2</sup>, 0° tilt and 0° Rotation



(b) Phosphorus range profile at energy 30 keV, dose  $1 \times 10^{16}$  ions/cm<sup>2</sup>, 0° tilt 0° Rotation

그림 3. 가상 궤적 발생 알고리즘을 사용한 결과와 사용하지 않은 결과에 대한 이온 주입된 1차원 불순물 분포 비교도(SIMS 측정치는 문헌 [26-27]에서 발췌하였다.)

Fig. 3. 1-D comparison of the implanted range profiles with and without the virtual trajectory split method(SIMS experiments are taken from Ref. [26-27]): (a) Boron range profile implanted at energy 5 keV, dose  $2 \times 10^{16}$  ions/cm<sup>2</sup>, 0° tilt (b) Phosphorus range profile at energy 30 keV, dose  $1 \times 10^{16}$  ions/cm<sup>2</sup>, 0° tilt and 0° rotation, respectively.

시뮬레이션 입자의 초기 10% 계산이 완료되면 이온 주입되는 1차원 깊이 방향으로 계산되어 온 평균 입사 거리  $R_p$ (average range)를 사용하여 등간격 거리(SplitDistance)를 재조정한다. 단, 이때에도 초기에 설정된 N개의 분리선을 유지하며, 평균 입사 거리 간격으로 등간격을 유지한다.

디채널링(dechanneling) 효과가 큰 경사 이온 주입(tilt implantation) 및 높은 도즈 이온 주입(high dose implantation)인 경우에는 이온 주입 범위가 수

직 입사( $0^\circ$ -tilt implantation) 및 낮은 도즈에 비해 이온들이 디체널링 되어 실리콘 표면 쪽으로 치우치게 되므로 고정된 분리 간격으로는 역동적으로 충분한 가상 궤적을 생성시킬 수 없게 된다. 이러한 이온 주입 범위의 변화를 고려하여 깊이 방향으로 분리 등간격은 매 10% 마다 간격을 재조정하도록 고려한다.

I 및 II 영역을 포함한 전 영역에 대해 이온 입사 방향(실리콘 벌크(bulk)) 방향으로의 분리선을 넘는 다음 부 영역의 첫 충돌에서 이온이 분리되는 분리 점(split point)을 정의한다. 이전 가중치를 분리 가짓수로 나눈 가중치가 분리된 후의 가중치가 된다. 따라서, 도즈에 따른 한 개의 시물레이션 입자가 갖게 되는 초기 가중치  $W$  (이온주입영역( $\text{cm}^2$ )이온주입도즈량( $\text{ions}/\text{cm}^2$ )/총시물레이션입자수(ions)) 그림 2에선  $W=1.0$ 으로 표시를 이러한 가상 궤적 발생 알고리즘을 적용하였을 때, 대략  $N \cdot f^n$  개가 최종 생성될 수 있다. 여기서,  $N$ 은 초기 시물레이션 입자 수(regular ions)이고,  $f$  는 분리 가짓수(split branches),  $n$ 은 존재하게 되는 분리선의 총 개수이다.

그러나 이러한 1차원 방법만을 적용하는 경우에 그림 1에서 보는 바와 같이 오픈 마스크 영역 하부의 깊이 방향 분포에 대한 잡음 영역을 최소화할 수 있게 되지만, 마스크 측면으로의 두 측면 방향으로 존재하게 되는 3차원적 문제인 측면 잡음 영역이 여전히 발생할 여지가 있으므로 이러한 측면 잡음 영역을 최소화하기 위해서는 이온 주입되는 윈도우 영역을 벗어나는 두 측면 방향으로의 분리 조건을 동시에 고려해야만 한다.

양 측면 방향에 대해선 깊이 방향에서와 마찬가지로 등간격 분리선을 설정하고, 초기 시물레이션 이온의 10%에 대해 적용한 (3) 식의 결정 값의 1/2 등간격을 사용한다. 그림 2에 나타난 이온 주입 윈도우 영역 하부의 I 영역을 둘러싸고 있는 측면으로의 II 영역에만 적용한다. 즉, 종이 면에 수직인 축으로도 두 측면이 존재하게 되므로 4개의 측면 방향으로 이온 주입 영역을 벗어나서 산란 되어 들어가는 이온만을 분리시켰다. 이는 측면으로 산란 되어 퍼져 나가는 최대 측면 접합 부분의 잡음 영역을 최소화하고, 동시에 너무 많은 분리 궤적의 생성을 억제하여 급격한 시물레이션 시간의 증가를 억제하기 위해 고려되었다.

또한 이온 주입은 수 keV에서 수 MeV 까지 그 사용이 광범위 하지만, 대부분의 공정 조건은 200

keV 이하의 에너지 영역에서 이루어 지게 되므로, 이러한 에너지 영역에서의 특성을 고려해 주었다. 이 에너지 영역에서는 도펀트에 따라 다소 차이는 있지만 대부분 최대 농도가 꼬리부의 농도에 비해 실리콘 표면 쪽으로 치우치게 되고, 이온 주입 방향으로 갖게 되는 이온 운동량에 의해 대부분의 채널링 분포는 깊이 방향 쪽 깊숙이 분포하게 된다. 그러므로 이러한 채널링 영역을 효율적으로 시물레이션 하기 위해서는 이러한 분포 경향에 근거해 그림 1과 2에서의 깊이 및 측면 분리선을 깊이 방향에 대해선 이온 주입되어 진행하게 되는 방향으로 분리선을 넘어 각 부 영역으로 산란 되어 들어가는 이온에 대해서만 분리시키고, 측면 방향에 대해서도 더욱 마스크 측면 모서리를 벗어나 산란 되어 들어가는 이온에 대해서만 분리시킨다. 즉, 이온 주입된 역 방향으로의 산란이나 이온 주입 영역 하부의 I 영역으로 다시 돌아 들어오게 되는 산란은 가상 궤적 발생에서 제외하였다. 이는 분리선을 넘어 새로운 부 영역으로 산란 되어 들어가는 이온에 대해 이온 주입 특성과는 무관하게 분리시킬 경우 기하급수적인 이온의 증가로 오히려 컴퓨터 수행 시간이 급증하여 시물레이션을 제어하기가 어려워지므로 비효율적이 될 수도 있기 때문이다.

위에서 언급한 분리 조건에 대한 가정을 정리하면 다음과 같다.

1) 그림 2에서의 I 및 II 영역을 모두 포함하는 전 영역에 대해 우선적으로 깊이 방향 분리 조건만을 적용한다. 즉, 이온이 산란 되어 들어가는 실리콘 깊이 방향으로 분리선을 너머 설정된 부영역의 첫 충돌에서 분리된다. 이 점에서 바로 분리점을 정의 한다.

2) 1)번 조건을 만족하지 않는 이온 중에서도 그림 2의 II.번 영역에 대해서는 측면 분리 조건을 적용한다. 깊이 간격의 1/2 간격으로 존재하는 측면 분리선을 너머 산란 되어 들어가는 이온이 깊이 분리 조건을 만족하지 않더라도 윈도우 모서리로부터 더욱 멀어지는 측면 방향인 경우 이온 궤적을 분리시킨다. 따라서, II 영역에서는 깊이 및 측면 분리 조건을 동시에 갖게 되고, I 영역은 깊이 분리 조건만을 갖는다.

3) 분리된 이온은 그림 2.과 같이 분리 점에서의 분리 가짓수(split branches)에 따른 가중치( $1/\text{분리가짓수}$ )를 부여 받는다.

4) 처음 10%의 시물레이션 입자에 대해서는 (3)식에 의해 결정되는 깊이 방향으로  $N$ 개의 등간격 분리

선을 설정하고, 양 측면으로는 이온 주입 윈도우 모서리로부터 깊이 등간격의 1/2 간격 및 N/2개의 분리선을 설정하였다.

5) 초기 입자수의 10%가 계산 완료 후부터는 매 10%마다 계산된 깊이 방향 및 양 측면 방향으로의 평균 입사 거리로 깊이 및 측면 분리선의 등간격을 재조정한다.

6) 완전 역동 손상 모델<sup>[12]</sup>을 동시에 고려하게 되므로 분리된 후의 새로운 가중치 W는 문헌 [12]의 II.장 1절에서의 식 (1)과 식(3)의 이온 가중치 Wion이 된다. 이때, 분리 궤적에 대해 발생하게 되는 모든 반동 실리콘의 궤적을 추적 계산하였고, 이때 결합 효과(damage effect)를 문헌 [12]에서와 같이 고려한다. 따라서, 그림 5에서 보는 바와 같이 이온 주입에 의해 발생한 점결함 분포에 대한 잡음 영역도 동시에 줄어들게 된다.

위에서 제안한 3차원 가상 궤적 발생 모델과 함께 완전 역동 손상 모델<sup>[12]</sup>을 동시에 적용한 3차원 TRICSI 몬테 카를로 이온 주입 시뮬레이터를 통해 다양한 공정 조건에서의 3차원 이온 주입 분포 및 결합 분포에 대한 정확성과 효율성을 동시에 만족시킬 수가 있었다<sup>[20-22]</sup>.

### III. 시뮬레이션 결과

그림 3에서는 가상 궤적 발생 알고리즘을 적용한 경우와 적용하지 않은 경우에 있어서의 1차원 꼬리 부분의 잡음 영역을 최소화하는 정도를 나타낸 비교 결과이다. 그림 3(a)에서는 Boron 10,000개의 이온을 3개의 분리 가짓수로 분리시켰을 때의 시뮬레이션 결과와 가상 궤적 발생 알고리즘을 적용하지 않았을 때의 시뮬레이션 결과를 동시에 나타내었다. 농도 차이는 106 배 이상으로 나타나고 있으며, 가상 궤적 발생 알고리즘을 적용하지 않은 기존의 방법으로는 시뮬레이션이 불가능함을 잘 보여주고 있다. 공정 조건은 Boron을 에너지 5 keV, 경사각(tilt angle) 0°, 도즈  $2 \times 10^{16}$  [ions/cm<sup>2</sup>] 으로 입사시켰고, 가상 궤적 발생 알고리즘을 적용하지 않은 경우의 시뮬레이션 입자수는 10,000개였고 시뮬레이션 시간은 Pentium Pro 200 MHz PC에서 36분이었다.

그림 3(b)에서는 Phosphorus를 에너지 30 keV, 경사각(tilt angle) 0°, 회전각(rotation angle) 0°, 도

즈(dose)  $1 \times 10^{13}$  및  $1 \times 10^{16}$  [ions/cm<sup>2</sup>] 으로 시뮬레이션한 1차원 불순물 농도 분포 및 비정질화율 [%] (amorphized percent)에 대한 결과이다. 1차원 시뮬레이션의 경우 도즈에 따른 최적의 가상 궤적 조건을 나타낸 결과도이다.

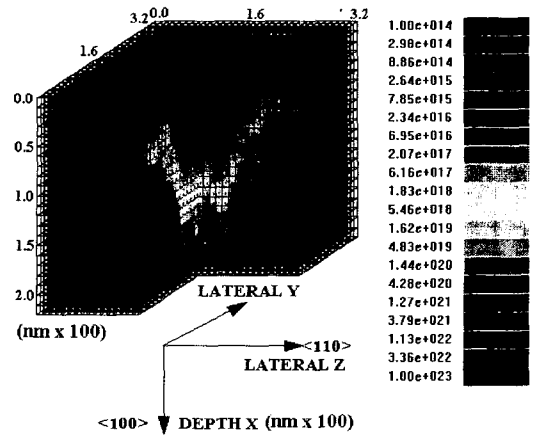


그림 4. 그림 3(a) 조건에서의 완전 역동 손상 모델<sup>[18]</sup>과 제안된 가상궤적 발생 알고리즘을 적용한 3차원 시뮬레이션 농도 분포도. 여기서, 굵은 연두색 선으로 나타낸 3/4 정사각형의 내부 영역은 이온 주입 영역을 나타낸다. 이온 주입 영역은  $1000 \times 1000 \text{ \AA}^2$  이다.

Fig. 4. The 3-D simulation result of Boron concentration profiles at the same implant condition with Fig. 1(a) which has been applied with the full-dynamic damage model<sup>[12]</sup> and the proposed 3-D trajectory split method. The 3/4-square-shaped thick lines on the implanted surface represent the implanted area which is  $1000 \times 1000 \text{ \AA}^2$ .

도즈  $1 \times 10^{13}$  [ions/cm<sup>2</sup>] 인 경우 1,000개의 초기 입자수를 사용하고 2개의 분리 가짓수 및 5개의 등간격 분리선을 사용하였고, 도즈  $1 \times 10^{16}$  [ions/cm<sup>2</sup>] 인 경우 10,000개의 초기 입자수, 3개의 분리 가짓수 및 10개의 등간격 분리선을 사용하여 1차원 잡음 영역을 최소화할 수 있었다. TRICSI 코드에서 3차원 시뮬레이션을 위해서는 시뮬레이션 도즈에 따라 초기 입자 수는 3,000 ~ 10,000로 설정하고 분리 가짓수는 3개, 분리 계수는 1.0 ~ 1.5로 설정하여 잡음 영역을 최소화시킬 수 있다. 여기서, 3차원 비정질 영역의 타당성을 입증하기 위해 시뮬레이션에 의해 예측된 1차원 깊이 방향으로의 비정질층의 두께를 문헌 [27]에서의 XTEM 측정값과 비교하였다.

화살표시가 되어 있는 92 [nm] 의 두께가 XTEM 측정값이며 계산 결과인 일직선의 수평선으로 표시된 비정질층 형성 농도(실리콘 농도의 20% 준위)의 깊이 방향 두께(비정질층 두께)는 90 [nm] 였다.

그림 4에서는 본 논문에서 제안한 모델링을 통해 얻은 저 에너지 Boron 이온 주입에 대한 3차원 이온 주입 분포에 대한 결과를 나타내었다. 공정 조건은 그림 3(a)에서와 같다. 3차원 결과는 10,000개의 초기 이온을 3개의 가지수를 갖는 3차원 가상 궤적 발생 알고리즘 및 3차원 완전 역동 손상 모델<sup>[18]</sup>을 적용 시뮬레이션한 결과이다.

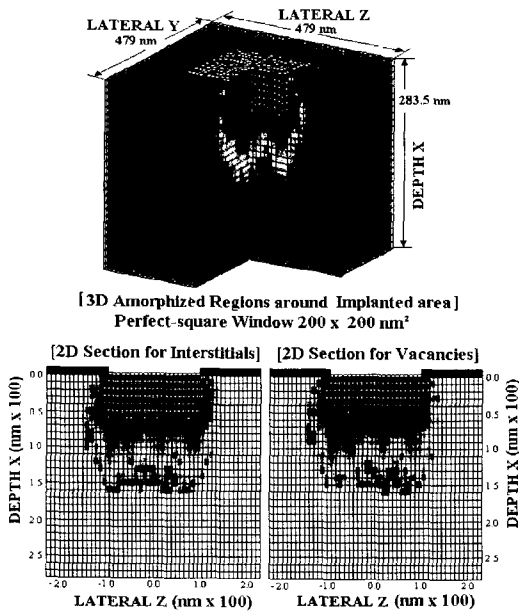


그림 5. 그림 3(a) 조건에서의 3차원 시뮬레이션 점결함 농도 분포도. 여기서, 흰색 원으로 표현된 영역이 완전 비정질 영역을 나타낸다. 이온 주입 영역은  $2000 \times 2000 \text{ \AA}^2$ 이다. 그리고, 2차원 결공(vacancy) 및 틈새(interstitial) 점결함 농도 분포도에서는 흰색 원으로 표현된 농도는 실리콘 농도의 10% 이상 영역을 나타낸다.

Fig. 5. The 3-D simulation result of point-defect concentration profiles at the same implant conditions with Fig. 3(a). The area drawn by white circles is completely amorphized region around the implanted window area. The implanted area is  $2000 \times 2000 \text{ \AA}^2$ . In the 2D profiles of each interstitial and vacancy, the circled concentrations are higher than 10% of silicon density.

영역을 최소화 시켰음을 잘 보여주고 있다. 1/4 체적을 식각한 구조, 1/2 체적을 식각한 후 정면으로 돌려 본 단면 표면에서의 이온 농도 분포를 함께 나타내었다. 가장 파란색은 저 농도( $1 \times 10^{14} \text{ [ions/cm}^2 \text{]}$  이하)를 가장 빨간색은 고농도( $1 \times 10^{23} \text{ [ions/cm}^2 \text{]}$  이상)를 나타낸다. 이온 주입 영역은 정사각형 공구조였으며 입사 면적은  $1000 \times 1000 \text{ \AA}^2$ 이었다. 농도를 표현하기 위한 단위 체적(unit volume)은  $100 \times 100 \times 100 \text{ \AA}^3$ 이었다. 웨이퍼의 백그라운드 농도(background concentration)는 표시하지 않았다. 컴퓨터 수행 시간은 Pentium Pro 200 MHz에서 8시간 수행되었다.

그림 5에서는 그림 3(a)의 공정 조건에서 Boron 이온 주입에서 발생한 점결함 분포를 동시에 나타내었다. 가상 궤적 발생시 이들의 가중치에 따라 시뮬레이션하므로 점결함 분포의 잡음 영역도 동시에 최적화했음을 보여주는 결과도 이다. 결함 분포를 1/4 절단한 구조 및 1/2 절단한 그림으로 나타내었다. 입사 면적은  $2000 \times 2000 \text{ \AA}^2$ 이었고, 농도를 표현하기 위한 단위 체적(unit volume)은  $100 \times 100 \times 100 \text{ \AA}^3$ 으로 설정하였다. 분리 가지수는 3개로 설정하였고, 5,000개의 초기 시뮬레이션 입자 수를 사용하여 60만개 정도의 정지 이온을 얻을 수 있었다. 여기서, 흰색 원으로 나타낸 영역은 실리콘 농도의 10% 이상 영역으로 3차원적으로 비정질화된 영역을 나타낸다. 틈새 및 결공 분포도에서는 10% 이상 영역이 틈새 분포가 깊이 및 측면 방향으로 더 확대되어 나타나고 있는 데 이는 수직 입사된 이온 운동량의 직진성에 의해 반동된 실리콘 틈새가 결공에 비해 더 실리콘 벌크쪽으로 반동되어 들어간 채널링 현상으로 사료된다.

#### IV. 결론

물리적 토대의 몬테 카를로 이온 주입 시뮬레이션의 단점인 과도한 컴퓨터 시뮬레이션 시간을 단축시키고 3차원 이온 주입 영역에서의 통계적 잡음 분포를 최소화 하기 위해 3차원 가상 궤적 알고리즘을 개발하였다. 수행 시간은 가상 궤적 알고리즘을 사용하지 않은 경우에 비해 36배 정도의 수행 시간 단축을 얻을 수 있었으며, 측면 및 깊이 방향으로의 통계적 잡음 영역을 최소화 시킬 수 있었다. 고 에너지 및 높은 도즈를 고려하고 1차원 시뮬레이션만을 수행하는 경우에는

생성된 입자는 대략 백만( $10^6$ ) 개 정도 였고, 잡음



1,000개에서 3,000개의 입자 수를 사용하고 2개의 분리 가짓수 및 분리 계수 1에서 1.5의 설정이 TRICSI 시뮬레이터에서 최적화된 1차원 분포를 얻을 수 있었다. 3차원인 경우에는 입사 되는 영역의 크기와 표현하고자 하는 영역을 표현하기 위한 최소 단위 제적의 크기에 따라 달라지지만 5,000개에서 10,000개의 시뮬레이션 입자 수와 분리 계수 1.0 ~ 1.5 를 사용하고, 분리 가짓수는 3개로 설정하여 깊이 및 측면 잡음 영역을 최소화하여 효율적인 시뮬레이션을 수행할 수 있었다. 이때, 표현될 수 있는 농도 차이는  $10^8$  배 이상이며, 같은 생성 입자수를 기준으로 10배 이상의 수행 시간 감소 효과를 확인하였다.

본 논문에서 제안한 3차원 제적 발생 알고리즘을 적용하여 이온 주입 공정 모델링의 정확성과 효율성을 동시에 고려한 역동적인 이온 주입 공정 시뮬레이션을 성공적으로 수행할 수 있었으며, 이러한 이온 주입 분포 및 결합 분포에 대한 정보는 3차원 소자 시뮬레이션이나 후속 열처리 공정인 급속 열처리 공정에서의 확산 모델링 및 시뮬레이션에 유용한 정보를 제공할 수 있으리라 여겨진다. 효율성과 정확성을 고려하여 개발된 TRICSI 시뮬레이터가 한층 반도체 소자 제작 공정 및 소자 개발 공정에 적용될 수 있는 가능성을 높여 주었다. 현재의 TRICSI 시뮬레이션 코드는 가능한 한 이온 주입 장비 특성에 잘 맞추어질 수 있도록 많은 공정 조건에 따른 변수들을 사용자가 설정할 수 있도록 구성되어 있으며, 반도체 소자 제작 공정에서 중요한 도펀트인 B, BF<sub>2</sub>, P 및 As에 대해 각각의 이온 주입 공정 변수들의 조합에 따른 검증 작업이 진행되고 있다. <110> 및 <111> 실리콘 웨이퍼에 대한 3차원 시뮬레이션도 가능하도록 구성되어 있으며, Zinblende 구조의 III-V 화합물 반도체인 GaAs, InP 와 같은 물질에서도 이온 주입 시뮬레이션이 가능하도록 프로그램 되어 있다.

참 고 문 헌

[1] G. Hobler, "Net Point Defect Concentrations After Ion Implantation in Silicon," Proceeding of the 4th International Symposium on *Process Physics and Modeling in Semiconductor Technology*, pp. 509-521, 1996.

[2] M. Posselt, "3D modeling of ion implantation into crystalline silicon: influence of damage accumulation on dopant profiles," *Nucl. Inst. and Meth.*, B96, pp. 163-167, 1995.

[3] K.M. Klein, C. Park, and A.F. Tasch, "Modeling of cumulative damage effects on ion implantation profiles", *Nucl. Inst. and Meth.*, B59/60, pp. 60-64, 1991.

[4] S.-H. Yang et. al, "An Accurate Monte Carlo Binary Collision Model for BF<sub>2</sub> Implants into (100)Single-Crystal Silicon," Proceeding of the 4th International Symposium on *Process Physics and Modeling in Semiconductor Technology*, pp. 481-494, 1996.

[5] ECS96(Electrochemical Society '96 Spring Meeting, L.A., USA) 국제회의장에서 S.-H. Yang 박사와 개인적 의견 교환, 1996년 5월

[6] M. Posselt and B. Schmidt, C.S. Murthy, T. Feudel, "Modeling of Damage Accumulation during Ion Implantation into Single-Crystalline Silicon," Proceeding of the 4th International Symposium on *Process Physics and Modeling in Semiconductor Technology*, pp. 453-467, 1996.

[7] M. Posselt, "Dynamic simulation of damage accumulation during ion implantation of BF<sub>2</sub><sup>+</sup> molecular ions into crystalline silicon," *Nucl. Inst. and Meth.*, B102, 1995.

[8] 손명식, 이준하, 송영진, 황호정, "<100>방향 실리콘 단결정에서의 저 에너지 붕소 이온 주입 공정에 대한 3차원 몬테 카를로 시뮬레이션 및 마스크 효과," 전자공학회지, 제32권 A편, 제8호, pp. 94-106, 1995년 8월

[9] M. Son, H. Park, H. Hwang, Three-Dimensional Monte Carlo Simulation of Boron Implantation into <100> Single-Crystal Silicon Considering Mask Structure, Proceeding of the 6th international Conference on *Simulation of Semiconductor Devices and Processes*, vol. 6, pp. 214-217, 1995.

- [ 10 ] Myung-Sik Son, Jun-Ha Lee, Ki-Ryang Byun, Ho-Jung Hwang, Three-Dimensional Monte Carlo Simulation of Implanted Boron and Damage Distribution in Crystalline Silicon Considering Mask Structure, *Proceeding of the 4th International Symposium on Process Physics and Modeling in Semiconductor Technology*, pp. 496-508, 1996.
- [ 11 ] Myung-Sik Son, Jun-Ha Lee, Ho-Jung Hwang, Development of Physically Based 3D Computer Simulation Code TRICSI for Ion Implantation into Crystalline Silicon, *J. of Korean Vacuum Science & Technology*, vol. 1, no. 1, pp. 1-12, June 1997.
- [ 12 ] 손명식, 황호정, 이온 주입시의 점결함 발생과 재결합에 관한 3차원 몬테 카를로 모델링 및 시뮬레이션, *전자공학회지*, 제34권 D편, 제5호, pp. 32-44, 1997년 5월
- [ 13 ] S.H. Yang, D. Lim, S.J. Morris, A.F. Tasch, "Improved efficiency in Monte Carlo simulation of ion implanted profiles in single-crystal materials," *Nucl. Inst. and Meth.*, B 102, pp. 242-246, 1995.
- [ 14 ] Walter Bohmayr et. al, "Trajectory Split Method for Monte Carlo Simulation of Ion Implantation," *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, vol. 8, no. 4, p. 402-407, Nov.1995.
- [ 15 ] J. F. Ziegler et. al, *The stopping and Range of Ions in Solids*, vol. I, New York : Pergamon, 1985.
- [ 16 ] J. F. Ziegler, *Handbook of Ion Implantation Technology*, North-Holland, 1992.
- [ 17 ] M. Jaraiz et. al, *Vacuum* 44, 321(1991)
- [ 18 ] M. Servidori et. al, "Defect Distribution in Ion Implanted Silicon: Comparison between Monte Carlo Simulation and Triple X-Ray Measurements", *Nucl. Inst. and Meth.*, B22, pp. 397-498, 1987.
- [ 19 ] A.M. Mazzone, *Phys.Stat. Sol.* 9 (a), vol. 95, pp. 149, 1986.
- [ 20 ] Myung-Sik Son, Ho-Jung Hwang, "Three-Dimensional Monte Carlo Modeling and Dynamic Simulation of Ion Implantation into Crystalline Silicon," *191th ECS spring Meeting Abstracts*, Canada, May 1997.
- [ 21 ] 손명식, 황호정, "ULSI CMOS 공정 기술 개발 및 제조를 위한 물리적 토대의 3차원 이온 주입 공정 모델링 및 시뮬레이션", 1997년도 전자공학회 하계종합학술대회 논문집, vol. 20. no. 1., pp. 336-339, 1997년 6월
- [ 22 ] Myung-Sik Son, H.J. Hwang, Jun-ha Lee, Hoong-Joo Lee, and Tae-Soo Park, "Physically Based Three-Dimensional Modeling of Ion Implantation for ULSI and GSI Device Technology and Manufacturing," *5th ICVC'97*, pp. 127-129, Seoul, Korea, October 13-15 1997.
- [ 23 ] C. Park, K.M. Klein, A.F. Tasch, and J.F. Ziegler, Critical angles for channeling of Boron Ions implanted into Single-Crystal Silicon,, *J. electrochem. Soc.*, vol. 138, no. 7, pp. 2107-2115, 1991.
- [ 24 ] M. Jaraiz, J.Arias, L.A. Marqué, L.Pelaz, L.Bailó, and J. Barbolla, Dechanneling by Thermal Vibrations in silicon Ion Implantation, *X international conference on ion implantation technology abstracts*, pp. 2. 19-20, 1994.
- [ 25 ] Wiliam T. Vetterling, Saul, A. Teukolsky, Wiliam H. Press, Brian P. Flannery, *Numerical Recipes in C*, Second Edition, Cambridge University Press, 1992.
- [ 26 ] Masami Hane et. al, "A Model for Boron Short Time Diffusion after Ion Implantation," *IEEE IEDM '91 Tech. Dig.*, pp. 701-704, 1991.
- [ 27 ] M. Posselt, B. Schmidt, C.S. Murthy, T. Feudel, K. Suzuki, Modeling of Damage Accumulation during Ion Implantation into Single-Crystalline Silicon, *J. Electrochem. Soc.*, vol. 144, no. 4, pp. 1495-1504, April 1997.

저 자 소 개



孫明植(正會員)

1967년 7월 20일생. 1992년 2월 중앙대학교 전자공학과 졸업. 1995년 2월 중앙대학교 대학원 전자공학과 석사. 1995년 3월 ~ 현재 중앙대학교 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