

고전 분자 동역학 시뮬레이션을 이용한 실리콘 격자 손상과 극 저 에너지 붕소 이온 주입에 관한 연구

(A Study on the Silicon Damages and Ultra-Low Energy Boron Ion Implantation using Classical Molecular Dynamics Simulation)

姜正遠*, 康裕碩*, 孫明植*, 卞起良*, 黃好正*

(Jeong-Won Kang, Eu-Seok Kang, Myung-Sik Son, Ki-Ryang Byun, and Ho-Jung Hwang)

요 약

극 저 에너지 실리콘 이온 주입 시뮬레이션을 통하여 실리콘 내부에서 발생하는 격자 손상에 대하여 고전 분자 동역학을 사용하여 시뮬레이션 하였다. 또한 최근에 개발된 EDIP 전위식이 실리콘 충돌 계산에 적합한 지 여부를 분자 동역학을 사용하여 계산하였다. EDIP 전위식은 평형상태 계산에 알맞지만 충돌을 계산하는 데는 적합하지 않았다. 또한 MDRANGE를 실리콘 공정에 맞도록 향상시켜 200eV, 500eV, 그리고 1000eV 에너지 붕소 이온 주입 시뮬레이션을 수행하여 실리콘 기판의 온도, 기울기 각도, 및 에너지에 따른 붕소의 분포를 계산하였다. 1000eV 이하 에너지 붕소 이온 주입에서도 채널링 현상에 대한 고려가 필요하다는 것을 알 수 있었다.

Abstract

We have calculated ultra-low energy silicon-self ion implantations and silicon damages through classical molecular dynamics simulation using empirical potentials. We tested whether the recently developed Environment-Dependent Interatomic Potential(EDIP) was suitable for ultra low energy ion implantation simulation, and found that point defects formation energies were in good agreement with other theoretical calculations, but the calculated vacancy migration energy was overestimated. Most of the damages that are produced by collision cascades are concentrated into amorphous-like pockets. Also, We upgraded MDRANGE code for silicon ion implantation process simulation. We simulated ultra-low energy boron ion implantation, 200eV, 500eV, and 1000eV respectively, and calculated boron profiles with silicon substrate temperature and tilt angle. We investigated that below 1000eV, channeling effect must be considered.

I. 서 론

* 正會員, 中央大學校 電子工學科

(Department of Electronic engineering, Chung-Ang Univ.)

接受日字:1998年7月31日, 수정완료일:1998年11月5日

반도체 제조공정에서 널리 이용되고 있는 이온 주입 기술의 정교한 공정 제어를 위하여서는 보다 정확한 결함 생성(damage production)에 관한 정보가 요구

되고 있다. 이온 주입에 의하여 원자들의 충돌이 발생하고, 이들에 의해서 점 결함이 만들어지므로, 이온의 충돌과 점 결함에 관한 정확한 메커니즘 규명에 관한 연구가 많은 사람들에 의하여 진행되어오고 있다^[1-8]. 비록 실리콘 내에서 연속적인 충돌에 관한 최종적인 격자 결함(damage) 연구 결과들이 발표되고 있으나, 측정의 어려움으로 인하여 아직까지 순수하게 이론적인 범주를 벗어나지 못하고 있다. 이와 같은 원자 단위의 연구는 반도체 소자 제조 공정에 있어서 중요한 정보를 제공함으로써, 반도체 소자 특성 결정에 중요한 영향을 끼치기 때문에 반도체 공정, 소자 시뮬레이션 계층구조의 가장 기본이 되고 있다. 향후 10년 이내에 MOSFET는 50nm 정도의 크기를 가지며, 드레인/소스 형성을 위한 이온주입 공정의 마스크 창은 $100\text{\AA} \times 100\text{\AA}$ 정도가 될 것이다^[9]. 이러한 나노미터 영역의 공정 시뮬레이션 수행은 반드시 원자 단위에서만 가능한 것이다.

원자들의 연속적인 충돌로 발생하는 격자 손상에 관한 많은 연구들이 최근에 진행되었지만,^[1-7] 반도체 소자의 나노미터 영역 크기에서의 격자 손상 발생 메커니즘은 아직도 시작 단계에 있는 것이다. 격자 손상 발생 메커니즘은 보통 물질 내부에서 한 원자에 초기 에너지를 주고, 그 원자에 의해서 발생하는 격자 결함에 관한 연구에 의하여 이루어진다^[1-6]. 그러나 소자 제작을 위해서는 실질적인 이온 주입에서와 같이 표면으로부터의 극 저 에너지 이온 주입에 의한 격자 결함 발생에 관한 연구가 필요할 것이다. 따라서 본 연구에서는 0.2~2 keV 에너지를 갖는 실리콘 셀프 이온을 표면 위로 이온 주입시켰다. AIMD(ab initio molecular dynamics)나 ETB(empirical tight-binding) 방법이 갖는 과도한 계산량과 계산 시간량으로 인하여 비교적 빠르고 정확성이 뛰어난 CMD(classical molecular dynamics) 방법^[11]으로 시뮬레이션을 수행하였다. 이를 위해 필요한 원자 상호간의 전위식 중에서 최근에 발표된 EDIP(Environment Dependent Interatomic Potential)^[15]가 실리콘 물질의 이온 주입 시뮬레이션에 충분한 정확성을 갖고 사용될 수 있는지를 평가하기 위해 점 결함 형성 에너지 및 결공(vacancy) 확산 에너지를 EDIP로써 계산하여 정확성이 뛰어난 AIMD의 DFT(density functional theory)^[22] 및 ETB 결과와 비교하였다. 또한 극 저 에너지 이온 주입시의 깊이 방향에 대한

이온 농도 분포를 계산하기 위하여 분자 동역학 시뮬레이터인 MDRANGE^[14]를 반도체 공정에 맞도록 개선하여 붕소 이온 주입을 시뮬레이션 하였다. 실리콘 기판의 온도, 기울기 각도, 및 에너지에 따른 계산 결과를 비교하였다.

II. 시뮬레이션을 위한 이론 및 계산 방법

1. 원자간 전위 에너지 계산

MD계산 결과는 사용되는 원자간 전위식에 매우 민감하기 때문에, 사용되는 전위식에 따라서 결과는 달라진다. 원자간에 작용하는 다원자간 전위(many-body potential)는 경험적인 전위식을 사용하여 계산되었다. 실리콘 원자 상호간에 작용되는 전위 에너지는 가장 널리 사용되고 있는 SW(Stillinger-Weber) 전위식^[16]을 사용하여 계산하였으며, 이들은 두 원자간 상호작용과 세 원자간 상호작용으로 근사화되었다. SW 전위식은 평형상태에 맞도록 변수들이 선택되어져 있기 때문에 원자간 충돌이나 근거리 반발 에너지 계산이 부정확하다. 대신에 근거리 원자간의 강한 반발 에너지를 정확하게 묘사하기 위해서는 ZBL(Ziegler, Biersack, and Littmark) 전위식을 사용하여 계산하는 Garter et al.의 방법^[17]을 사용하였다.

극 저 에너지 이온 주입에서 전자 저지력은 거의 무시될 수 있지만, 본 연구에서는 더욱 정확한 계산을 위하여 Firsov 모델을 사용하였으며, 이 때의 반발력은 다음과 같다^[18].

$$F_{es} = \vec{r}_{12} (8/06172 \times 10^{-2} Z^2) \left(e^{-c} \sum_{m=0}^7 (C^m/m!) \right) \left(\frac{eV}{\text{\AA}} \right) \quad (1)$$

여기서 $C = 13.4646 Z^{1/12} (r_{12})^{1/4}$ 이다.

식(1)에 의해서 계산된 전자 저지력은 원자간 전위식에 의해서 계산된 힘에 합해진다.

최근에 개발된 EDIP 전위식^[15]은 원자의 결합 차수에 의한 전위식이다. EDIP 전위식에서 변수는 원자간 거리와 근접 원자 차수이다. 이 방법은 근접 원자들이 증가할수록 두 원자간 화학 결합이 약해진다는 간단한 물리적인 고찰로부터 나왔다. 총 전위 에너지는 두 원자간 전위 에너지와 세 원자간 전위에너지의 합으로 계산된다.

$$E_i = \sum_j V_2(R_{ij}, Z_i) + \sum_{jk} V_3(\vec{R}_{ij}, \vec{R}_{ik}, Z_i) \quad (2)$$

$V_2(R_{ij}, Z_i)$ 는 i, j 두 원자간 상호작용이고, $V_3(\vec{R}_{ij},$

\vec{R}_{ik}, Z_i) 는 i 원자를 중심으로 i, j, k 원자 사이의 상호작용을 표현한다. R_{ij} 는 i 와 j 원자간의 거리이다. 여기서 i 원자에 대한 유효 좌표 수 (effective coordination number) Z_i 는 다음과 같이 정의된다.

$$Z_i = \sum_{m \neq i} f(R_{im}) \quad (3)$$

거리 R_{im} 을 r 로 나타내면, 식(3)에서 Neighbor function(NF) $f(r)$ 은 다음과 같다.

$$f(r) = \begin{cases} 1 & \text{if } r < c \\ \exp\left(\frac{a}{1-x^3}\right) & \text{if } c < r < b \\ 0 & \text{if } r > b \end{cases}$$

여기서 $x = \frac{(r-c)}{(b-c)}$ 이다. 원자간 거리가 $r < c$ 일 경우는 완전히 이웃하는 원자(full neighbor)로 고려되고, c 와 b 사이에 있는 원자들은 좌표에 따라서 부분적으로 이웃하는 원자들이 된다. 원자간 거리가 b 이상인 경우에는 원자간의 상호작용이 없는 것으로 간주한다.

두 원자간의 상호작용에 의하여 반발력 항과 인력 항이 포함됨 전위식이 식(4)와 같이 표현된다.

$$V_2(r, Z) = A\left[\left(\frac{B}{r}\right)^{\rho} - b(Z)\right] \exp\left(\frac{\sigma}{r-a}\right) \quad r < a \quad (4)$$

상호 작용하는 근접 원자들이 증가할수록 인력이 약해진다는 물리적인 고찰과 이론적인 계산으로부터 $b(Z) = e^{-\beta Z^2}$ 이 된다^[15].

세 원자간 상호작용은 거리에 대한 항 $g(r)$ 와 각도에 대한 항 $h(\theta, Z)$ 로 구성된다.

$$V_{3i}(\vec{R}_{ij}, \vec{R}_{ik}, Z_i) = g(R_{ij})g(R_{ik})h(l_{ijk}, Z_i) \quad (5)$$

여기서 $l_{ijk} = \frac{\vec{R}_{ij} \cdot \vec{R}_{ik}}{R_{ij} R_{ik}}$

거리에 대한 항은 SW 전위식 때와 같으므로 식(6)과 같다.

$$g(r) = \exp\left(\frac{\gamma}{r-b}\right) \quad (6)$$

각도 함수 $h(l, Z)$ 는 각도와 유효 좌표 수의 함수로 구성된다.

$$h(l, Z) = H\left(\frac{l + \tau(Z)}{w(Z)}\right) \quad (7)$$

$H(x)$ 는 generic function이다.

Bazant et al.은 각도에 대하여 다음과 같은 특별한 함수를 선택하였다^[15]

$$h(l, Z) = \lambda[1 - \exp(-Q(Z)(l + \tau(Z))^2)] \quad (8)$$

함수 $\tau(Z) = -l_0(Z) = -\cos(\theta(Z))$ 는 세 원자간의 각도에 대한 함수를 의미한다. sp^2 결합 때의 세 원자간 결합 각도 $\theta(3) = 120^\circ$ 이며, sp^3, sp 결합 때는 각각 $\theta(4) = 109.47^\circ, \theta(2) = \theta(6) = 90^\circ$ 가 된다. 이러한 각도의 조건을 만족하는 함수 τ 를 다음과 같이 일반적인 모양으로 식 (9)와 같이 표현한다.

$$\tau(Z) = u_1 + u_2(u_3 e^{-u_1 Z} - e^{-2u_1 Z}) \quad (9)$$

여기서 $u_1 = -0.165799, u_2 = 32.557, u_3 = 0.286198, u_4 = 0.66$ 이다.

또 다른 함수 $Q(Z) = Q_0 e^{-\mu Z}$ 는 각도에 따른 결합력의 세기를 의미한다.

EDIP 전위식에 사용되는 나머지 변수들은 다음과 같다.

$$A = 12.360638 \text{ eV}, \quad B = 1.6039258 \text{ \AA}, \quad \rho = 1.3950202$$

$$a = 3.4557809 \text{ \AA}, \quad b = 3.1640691 \text{ \AA}, \quad c = 2.4504896 \text{ \AA}$$

$$\sigma = 1.3386900 \text{ \AA}, \quad \lambda = 0.4610305 \text{ eV}, \quad \gamma = 0.2037403 \text{ \AA}$$

$$Q_0 = 135.14236, \quad \mu = 0.7468472, \quad \beta = 0.0064757$$

$$a = 4.0000000$$

2. 분자 동역학 시뮬레이션

원자들의 최종 위치는 MD 방법을 사용하여 계산되었다. 점 결합 형성 에너지를 계산하기 위하여 원자들이 자유롭게 운동하여 에너지가 가장 낮은 위치에 도달할 때까지 계산되었다. 이온 주입을 위해서는, 주입된 이온의 운동에너지와 전위 에너지의 합이 5 eV 이하에서 정지하는 것으로 가정하였다. 계산 량을 줄이기 위해서 근접 원자 목록(neighbor atom list)을 메모리에 저장하고, 목록에서 수정이 필요한 원자들만을 대상으로 목록을 수정한다. 또한 주기적인 경계 조건에서 경계를 벗어난 원자들도 목록을 수정한다. 각 단계 시간은 0.1 fsec로 하였다.

이온 주입 시뮬레이션을 위한 초기조건으로 실리콘 기판의 설정온도에 따라서 실리콘 격자 원자들은 속도를 가지게 된다. 초기 실리콘 원자들의 속도 분포는 맥스웰-가우시안 분포를 가정하였다. 시뮬레이션 동안

온도를 일정하게 유지하기 위한 방법으로 각 시간 단계(time step) 마다 속도를 다음의 비율로 계산하였다 [19]

$$\left(\frac{T_0}{T}\right)^{1/2} \quad (9)$$

T 는 현재 계산된 운동 에너지 온도이고 T_0 는 초기에 설정된 온도이다.

이온 주입되기 전에 실리콘 격자 원자들은 실리콘 기판의 설정온도에 따른 Debye 온도를 사용하여 현실적인 열적 변위(thermal displacement)를 주었다.

모든 이온과 실리콘 원자는 전기적 중성으로 가정하였으며, 이온의 초기 속도는 이온의 에너지에 해당되는 속도를 가지도록 하였다. 실리콘 안으로 주입되는 이온들은 표면위에 4Å 위치에서 놓여지고, <001>방향으로 입사되었다.

점 결함 형성 에너지 및 결공의 확산 에너지 장벽 계산을 위해 63개~65개의 실리콘 원자를 사용하였다.

본 연구에서는 MD방법을 사용하여 깊이 방향 불순물 농도를 계산하는 코드인 MDRANGE를 개선하여 극 저 에너지 붕소 이온 주입을 시뮬레이션 하였다. MDRANGE는 PKA(primary kick-on atom) 시뮬레이션과 격자 손상 시뮬레이션 연구에 가장 널리 사용되고 있는 MOLDY [1,2,20] 보다 더 넓은 에너지 영역에 대하여 시뮬레이션이 가능하도록 RIA(recoil ion approximation) 방법을 사용하여 계산 속도를 향상시킨 코드이다. MDRANGE 코드는 이온 주입 공정에 대한 시뮬레이션에서 마스크 구조와 이온 도즈 시뮬레이션이 불가능하므로 이를 가능토록 하는 개선된 MDRANGE 코드를 개발하였다. 하지만 MDRANGE 코드는 격자 결함을 고려할 수 없다는 단점을 가지고 있다.

3. 결함 결정(Defect Detection) 과 결함 형성 에너지

응집 물질내의 결함들을 결정하는 데는 여러 방법들이 있는데, 본 논문에서는 Wigner-Setiz(WS) 방법 [21]을 사용한다. WS방법에서, 결정 격자점에 원자가 비어 있을 경우 이를 결공(vacancy)이라 정의하고, 격자점에 하나 이상의 원자들이 추가되어 있으면 이를 틈새(interstitial)라 정의한다.

실리콘 자기 틈새(self-interstitial)와 결공이 존재할 때, 점 결함 형성에너지 $E_f(Si_{i,v})$ 는 다음과 같이

정의된다.

$$E_f(Si_{i,v}) = E(Si + I, V) - \frac{N_{Si,i,v}}{N_{Si}} E(Si) \quad (9)$$

여기서 I 는 틈새, V 는 결공을 의미한다. $E(Si + I, V)$ 항은 결함을 포함한 총 에너지이고, $E(Si)$ 항은 완벽한 결정 실리콘 격자의 총 에너지이다. $N_{Si,i,v}$ 는 결함을 포함하는 총 실리콘 원자 개수이고, N_{Si} 는 결함을 포함하지 않는 결정 실리콘의 원자 개수이다.

III. 결과 및 분석

1. 점 결함 형성 에너지 및 결공 확산

SW 전위식과 최근 개발되어진 EDIP 전위식을 사용하여 점 결함 형성에너지와 결공 이동 에너지 장벽(vacancy migration energy barrier)을 계산한후 이를 비교하여 표 1에 나타내었다. 또한 각각의 결과들은 DFT(Density-Functional Theory) [22] AIMD 및 ETB(Empirical Tight-Binding) 방법을 사용한 결과 [23-28] 들과 비교되었다. EDIP 결과는 점 결함 형성에너지에서 SW보다는 DFT와 ETB 결과와 더 근사한 값들을 보여주고 있다. EDIP는 원자간 거리뿐만 아니라 근접 원자 수가 고려된 유효 좌표수의 함수이므로 다양한 실리콘 격자 결함에 대하여 더욱 현실적인 계산 결과를 얻을 수 있었다.

표 1. 실리콘 점 결함 형성에너지(eV) 비교. 괄호 안에 포함된 값들은 이완되지 않은 상태의 에너지. (V: vacancy, T-I: tetrahedral interstitial, H-I: hexagonal interstitial)

Table 1. Formation energies of various Si point defects(in eV) compared with other calculation. The values in parentheses are the unrelaxed energies. (V: vacancy, T-I: tetrahedral interstitial, H-I: hexagonal interstitial)

	DFT/LDA	ETB	SW	EDIP
V	3.3-4.3 ^(a)	3.68 ^(c)	2.32	3.49
T-I	3.7-4.8 ^(a)	4.3 ^(c)	4.82	4.33
H-I	3.3-4.4 ^(a)	4.93 ^(d)	6.58	5.34
Frakel	-	6.55 ^(c)	4.76	6.78
V-migration	0.3 ^(b)	0.3(1.0) ^(c)	0.32(0.94)	2.31(5.23)

^(a) Ref. [23-27] ^(b) Ref. [32] ^(c) Ref. [27] ^(d) Ref [28]

그러나 EDIP를 사용한 결공 이동 에너지 장벽 계산 결과는 다른 이론적인 계산들과 많은 차이들을 보였다. SW를 사용한 경우 이완되지 않은 상태 (unrelaxed)에서 결공 이동 에너지 장벽은 0.94 eV이고, 이완된 상태(relaxed)에서 결공 이동 에너지 장벽은 0.32 eV였다. 이들은 GSP(Goodwin, Skinner, and Pettifor) ETB를 사용한 계산 결과인 0.3 eV^[27]와 좋은 일치를 보여주고 있다. 반면에, EDIP 경우, 이완된 상태에서 결공 이동 에너지 장벽은 2.31 eV로 다른 이론적인 계산과 많은 차이를 보였다. 이와 같이 EDIP는 평형상태에서 다양한 격자 결함 형성 에너지 계산에서 다른 이론적인 계산과 잘 일치하지만, 이온들의 운동과 관련된 에너지 계산은 일치하지 않는다는 것을 알 수 있다. 이는 EDIP가 근거리의 강한 반발 에너지를 정확하게 포함하고 있지 않기 때문인 것으로 사료된다. 1Å 이하의 원자간 거리에서 EDIP는 ZBL 전위식과 많은 차이를 보이고 있다. 그러므로 EDIP는 평형 상태에 대한 시뮬레이션에는 알맞지만 실리콘 원자들의 연속적인 충돌과 이동을 묘사하는 데는 부적합하다는 것을 알 수 있다.

2. 극 저 에너지 실리콘 이온 주입에 따른 격자 손상 이온 주입에 의한 실리콘 내부에서의 연속적인 충돌로 인해 발생하는 격자 손상을 알기 위하여 SW 전위식을 사용하여 실리콘 셀프 이온 주입이 시뮬레이션되었다. 각각 200 eV, 500 eV, 1 keV, 2 keV를 가진 실리콘 원자가 <001> 방향의 실리콘에 기울기 10°로 주입되었다. 그림 1에서는, 서로 다른 에너지로 결정 실리콘 안으로 이온 주입된 각 경우에 대하여 시간에 따른 전위 에너지의 변화를 보여 주고 있다.

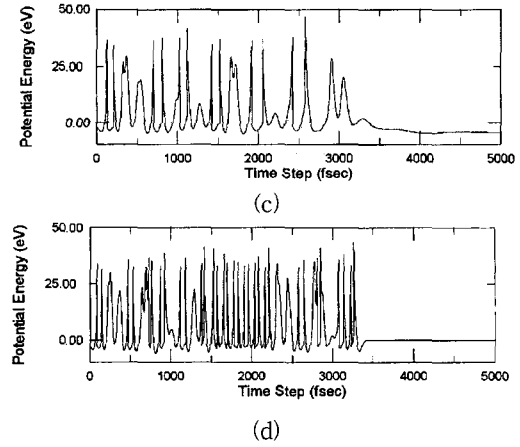
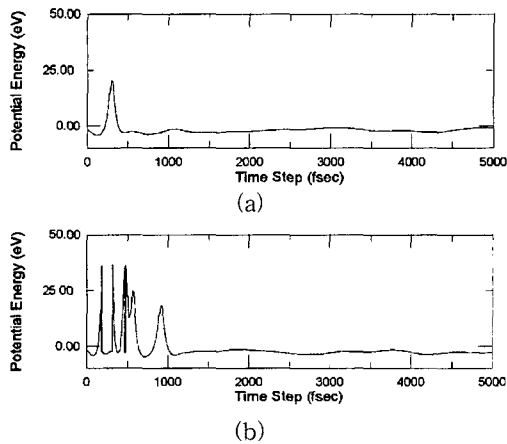
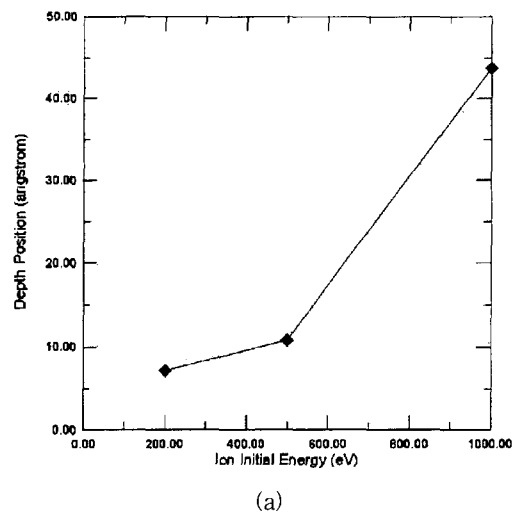
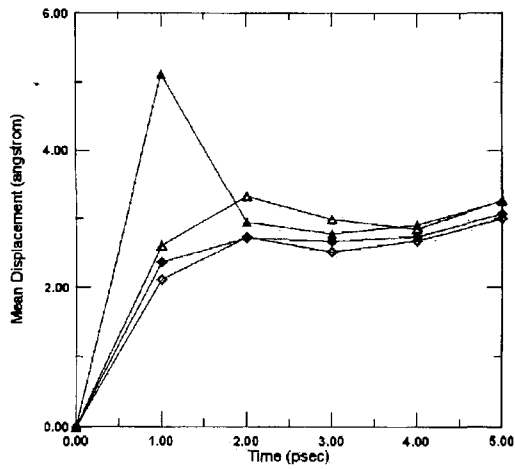


그림 1. 시간의 함수로 주입된 이온의 전위 에너지 변화 (a) 200eV, (b) 500eV, (c) 1000eV, 그리고 (d) 2000eV

Fig. 1. Potential energy variations of implant ions as a function time. (a) 200eV, (b) 500eV, (c) 1000eV, and (d) 2000eV.

그림 1a에서와 같이 이동하는 이온은 전위 에너지가 상승될 때 격자 원자와의 충돌이 일어나게 되며, 이때 운동에너지는 감소하게 된다. 주입된 이온 주입 에너지가 높을수록 동일한 시간동안에 더 많은 충돌이 일어나고 이온이 운동 에너지를 잃는 주기가 짧아진다.(참조 그림 1 b,c,d) 200 eV인 경우 대부분의 운동 에너지는 0.3 psec 이후에 잃게 된다. 2 keV인 경우, 이온은 3.5 psec때 시뮬레이션 영역을 통과하였다. 그림 2a와 같이 에너지가 높은 수록 이온은 표면으로부터 더 깊이 들어갔다.



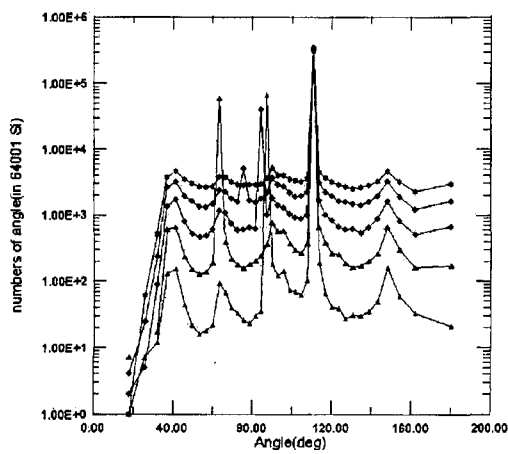


(b)

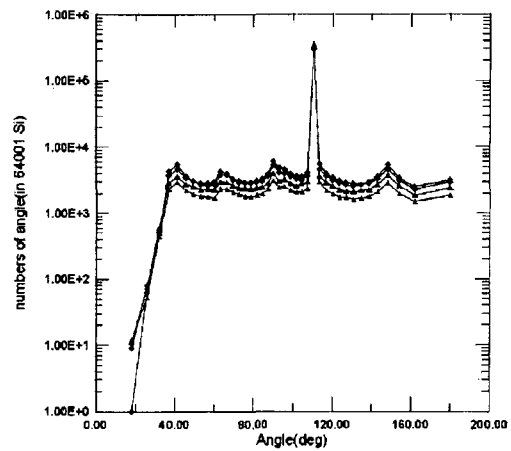
그림 2. 이온 주입 에너지에 따른 주입 깊이 및 평균 변위(mean displacement) a) 주입 깊이, b) 평균 변위 (200eV(▲), 500eV(△), 1000eV(◆), and 2000eV(◇)).

Fig. 2. Ions depths from surface(a), mean displacements with time and implant energies(b) (200eV(▲), 500eV(△), 1000eV(◆), and 2000eV(◇)).

그러나 그림 2b에서 알 수 있는 바와 같이 연속적인 충돌에 의해서 일어난 실리콘 틸새들의 이동된 평균 변위(mean displacement)는 에너지와는 거의 무관하였다. 200 eV인 경우, 1 psec 동안에 하나의 틸새(interstitial)이 발생하여 5.2Å 만큼 이동하지만, 이온 주입에 의해서 발생된 대부분의 틸새들은 평균 변위가 3Å 정도로 나타났다.



(a)



(b)

그림 3. 실리콘 이온 주입시 시간에 따른 실리콘 원자들의 결합 각도의 분포

a) 에너지 1keV, 1ps(▲), 2ps(△), 3ps(◆), 4ps(◇), 5ps(★) b) t=5 ps, 에너지 : 200eV(▲), 500eV(△), 1000eV(◆), 그리고 2000eV(◇)

Fig. 3. For 1keV Si-self ion implant, bond angle distribution with time, 1ps(▲), 2ps(△), 3ps(◆), 4ps(◇), and 5ps(★), respectively.(a) Bond angle distribution of various implant energy, 200eV(▲), 500eV(△), 1000eV(◆), and 2000eV(◇), respectively.(b)

그림 3은 64000개의 결정 실리콘에 실리콘 이온이 주입되어 나타난 실리콘 격자 결합 각도 분포를 보여 주고 있다. 1keV 실리콘 이온 주입인 경우, 시간에 따른 각도 분포는 그림 3a에 나타나 있다. 완벽한 다이아몬드 결합인 경우 그림에서 알 수 있는 바와 같이 결합 각도는 109.47° 이다. 시간이 지날수록 결합 각도 분포가 다이아몬드 구조에서 벗어나며 격자 결합이 증가되는 것을 볼 수 있다. 그림 3b는 5 psec에서 이온 주입 에너지에 따른 각도 분포를 보여 주고 있다. 에너지가 높을수록 다이아몬드 구조에서 벗어나는 것이 많아지는 것을 알 수 있다.

위의 시뮬레이션을 통하여 다이아몬드 구조를 하고 있는 실리콘 내부에서 이온 주입에 의해서 발생하는 격자 손상을 살펴보았다. 에너지가 높을 수록 더 많은 충돌로 인해 다이아몬드 구조에서 벗어나는 실리콘 격자들이 늘어나게 된다. 발생된 격자 손상들의 평균 변위는 주입 에너지에는 무관하게 3Å 정도이기 때문에 다른 MD 계산 결과^[29-31]와 같이 틸새들이 포함된

영역이 Ref. [33]의 결과와 같이 비정질화된 덩어리(amorphous-like pocket)를 형성하게 되는 것을 알 수 있다. GSI 소자 공정에서는 드레인과 소스 영역이 작아지고, 미세 접합 형성을 위하여 극 저 에너지 이온 주입이 필요하므로 이러한 비정질화된 덩어리들의 영향은 중요하게 고려되어야 한다.

3. 극 저 에너지 붕소 이온 주입 시뮬레이션

극 저 에너지 붕소 이온 주입 시뮬레이션은 RIA 방법을 사용하여 계산량을 효과적으로 줄인 MDRANGE를 실리콘 이온 주입 공정에 알맞도록 개선시켜 시뮬레이션 하였다. 공 구조 마스크는 100Å × 100Å로 하였다. 에너지는 200 eV, 500 eV, 및 1 keV로 하였고, 실리콘 기판의 온도가 77K, 300K, 또는 600K인 조건에 대하여 시뮬레이션 하였다. 또한 각각의 경우에 기울기 0° 와 7°, 도즈는 1×10¹⁵/cm²로 하고 1000개의 이온이 주입되었다.

표 2에서는 1000개 이온 중에서 실리콘 내부로 들어간 이온의 개수를 에너지와 온도, 그리고 기울기 각도에 따라 보여주고 있다. 일반적으로 온도가 높을수록 실리콘 표면에서 반발되는 이온의 개수가 늘어난다. 이러한 현상은 온도가 높을수록 실리콘 격자 원자들의 열적 진동(thermal vibration)이 커짐으로 인하여 충돌 확률이 높아지는데 기인된다. 또한 표면에 수직인 <001> 방향보다 기울기 각도 7° 에서 더 많은 이온들이 표면에서 반발되어 실리콘 내부로 들어가지 못하였음을 알 수 있다.

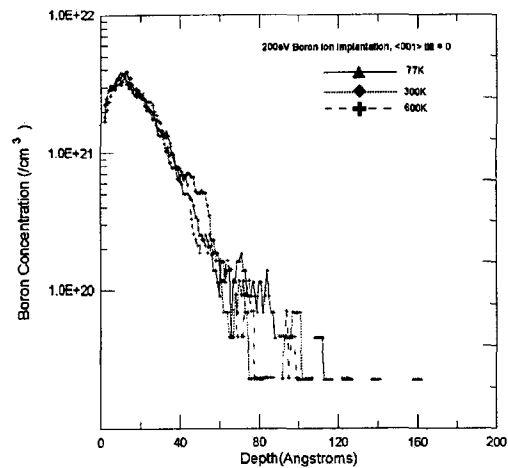
표 2. 200eV, 500eV, 1000eV 에너지 붕소 이온 주입시 실리콘 기판 내부로 들어간 붕소 불순물의 개수

Table 2. Number of boron penetrated into silicon with energy and tilt.

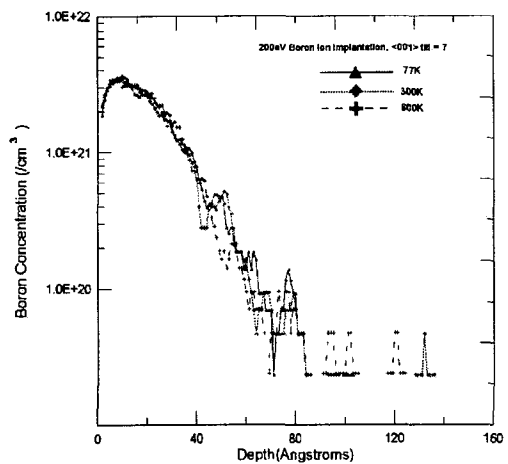
에너지 온도 및 경사도		200eV	500eV	1000eV
77K	tilt=0	876	914	952
	tilt=7	869	894	923
300K	tilt=0	872	914	948
	tilt=7	862	882	921
600K	tilt=0	859	890	926
	tilt=7	849	872	899

그림 4는 붕소 이온 주입에서 실리콘 기판 온도와

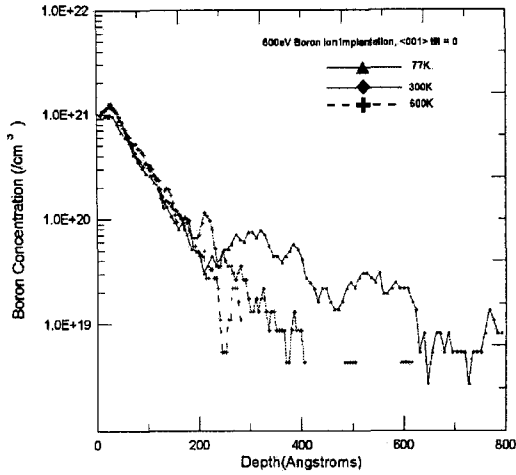
기울기 각도에 따른 깊이 방향 붕소 농도 분포를 보여 주고 있다. 200 eV인 경우, 농도 분포는 온도에 따라 큰 차이를 보이지 않지만 [그림 4 a, b], 1000 eV인 경우에는 온도에 따른 농도 분포 차이가 나타난다 [그림 4e,f]. 기울기 0° 일때의 일반적인 경향은 온도가 낮을수록 이온이 더 깊이 들어가는 것을 볼 수 있다. 그러나 0° 기울기를 갖는 경우에는, 온도에 거의 무관한 이온 주입 깊이를 얻을 수 있었다. 또한 기울기 각도에 따른 차이는 그림 5에서 보는 바와 같이 200 eV인 경우에는 농도 분포 차이가 거의 나타나지 않지만, 1000 eV인 경우에는 기울기 각도에 따른 농도 분포 차이가 크게 나타났다. 이와 같은 것은 200 eV의 극 저 에너지 붕소 이온을 주입할 경우에 채널링 현상이 거의 발생하지 않는데 기인된다.



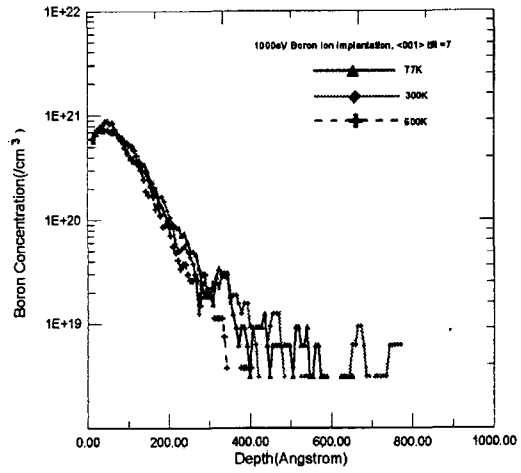
(a)



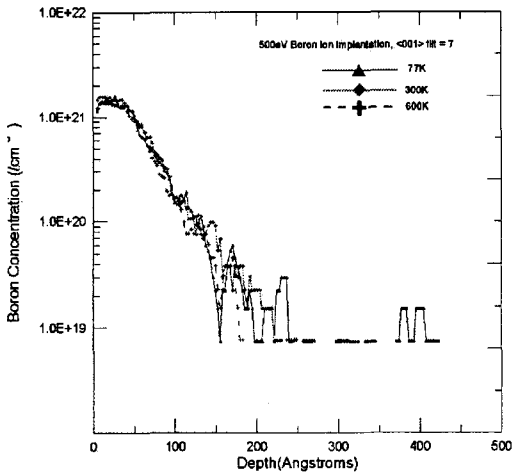
(b)



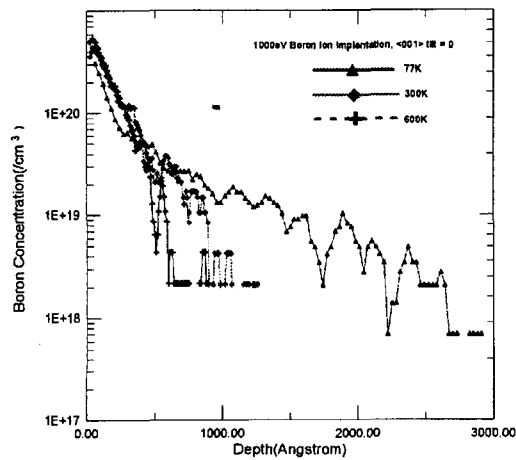
(c)



(f)



(d)



(e)

그림 4. 이온 주입 에너지, 실리콘 기판 온도, 및 기울기에 따른 1D 붕소 농도 분포 a) 200eV, 기울기 0°. b) 200eV, 기울기 7°. c) 500eV, 기울기 0°. d) 500eV, 기울기 7°. e) 1keV, 기울기 0°. f) 1keV, 기울기 7°

Fig. 4. 1D profiles with ion implant energy, silicon substrate temperature, and tilt. a)200eV, tilt=0 b)200eV, tilt=7 c)500eV, tilt=0 d)500eV, tilt=7 e)1000eV, tilt=0 f)1000eV, tilt=7

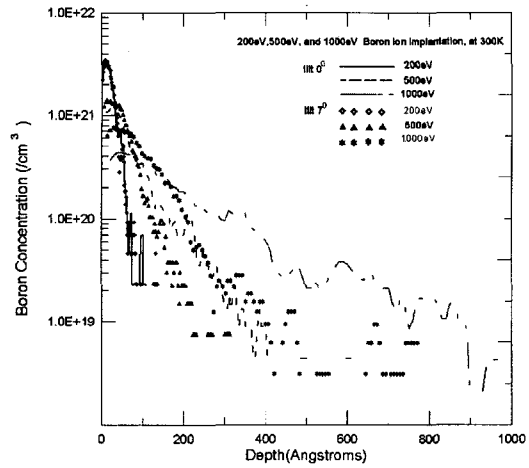


그림 5. 300K, 200eV, 500eV, 1keV 에너지 붕소 이온 주입시 기울기 7°의 효과

Fig. 5. Boron profiles with tilts, at 300K.

그림 6은 이온 주입 에너지와 기울기 각도에 따른 불순물 분포의 2차원 모양이다. 각 점들은 붕소 원자들을 나타낸다. 300K에서 200 eV, 500 eV, 1 keV에 대하여 기울기가 각각 0°, 7° 일 때이다. 기울기 7° 일 경우 깊이 방향 붕소 분포는 500eV 와 1 keV

에서 기울기 0° 일 때 보다 절반정도 줄어들었지만, 측면 분포에는 거의 변화가 없음을 볼 수 있다.

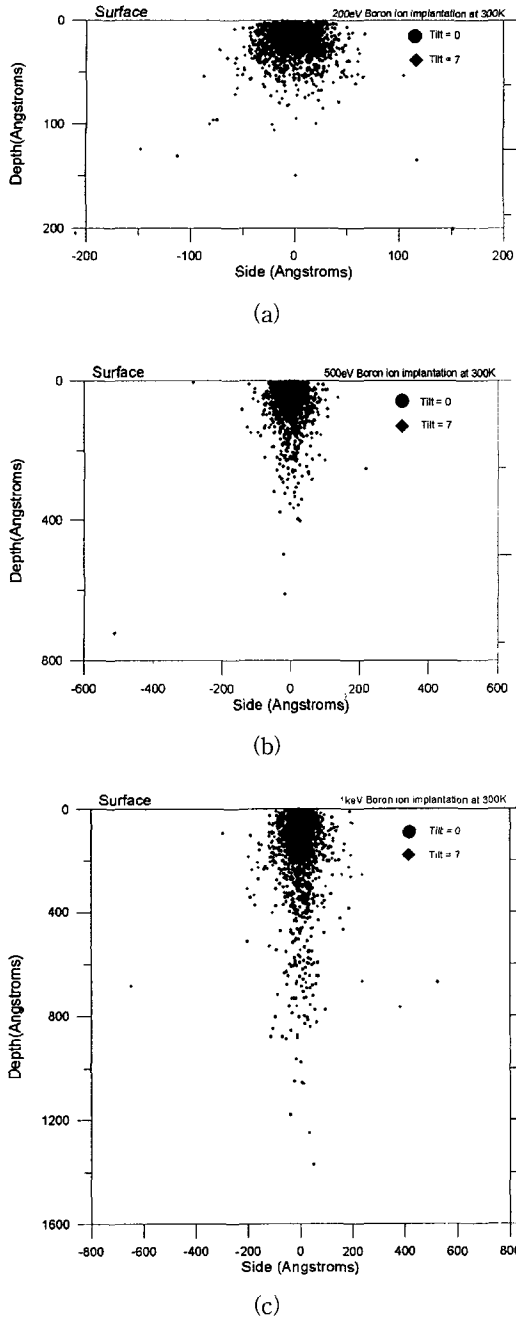


그림 6. 실리콘 기판 온도 300K에서 200eV, 500eV, 1keV 에너지 붕소 이온 주입시 기울기 각도에 따른 붕소의 깊이 방향의 분포와 측면 방향의 분포 비교, a) 200eV, b)500eV, c) 1keV

Fig. 6. Comparisons of Boron 2D profiles according to energies and tilts at 300K : a) 200eV, b)500eV, and c) 1keV, respectively.

그러나 200 eV인 경우에는 측면 방향 뿐 아니라 깊이 방향에도 거의 차이가 나타나지 않았다. 앞 단락에서 설명한 바와 같이 200 eV 붕소 이온 주입에서는 채널링 현상이 거의 일어나지 않기 때문에 기울기 각도에 따른 깊이 변화 역시 거의 나타나지 않음을 알 수 있다. 500eV이상의 에너지 붕소 이온 주입에서는 채널링 현상이 중요하게 고려되어야 할 것으로 여겨진다.

나노미터 영역에 1000개의 이온이 주입되었기 때문에 불순물 농도 분포가 부드러운 곡선으로 나타나지 않았지만, 그 경향성을 확실히 구분할 수 있었다. 위의 마스크 조건과 에너지 조건에서 나노미터 영역에 대한 측정이 불가능하기 때문에 현재로는 실험 결과와의 비교가 어려운 점이 있다.

IV. 결 론

최근에 개발된 EDIP 전위식을 사용하여 실리콘 점 결함 형성 에너지 및 결공 이동 에너지 장벽을 계산하였다. 계산 결과 EDIP 전위식은 점 결함 형성 에너지에서는 다른 이론적인 계산들과 잘 일치하였으나 결공 이동 에너지 장벽은 너무 높게 나타났다. 그러므로 EDIP 전위식은 실리콘 평형 상태 계산에는 알맞지만, 에너지를 가진 실리콘의 운동과 충돌을 계산하는 데는 적합하지 않다는 것을 알 수 있었다. 또한 이온 주입에 의해서 실리콘 내부의 연속적인 충돌로 발생된 틱새의 평균 변위(mean displacement)가 3Å 이내로 나타났다. 결국 틱새들은 비정질화된 영역의 덩어리를 형성하게 되는 것을 알 수 있었다. 이와 같은 나노미터 영역의 이온 주입에서 비정질화된 영역의 덩어리들은 연이어 들어오는 이온의 운동에 영향을 미치게 되므로 격자 결함을 고려한 현실적인 극 저 에너지 이온 주입 시뮬레이터의 개발이 요구된다.

MDRANGE를 개선하여 극 저 에너지 붕소 이온 주입 시뮬레이션이 수행되었다. 200 eV 붕소 이온 주입에서는 실리콘 기판의 온도와 기울기 각도 등의 조건 변화가 붕소 농도 분포에 영향을 거의 미치지 못하였다. 반면에, 500 eV와 1 keV 붕소 이온 주입에서는 실리콘 기판의 온도와 기울기 각도 등의 조건이 붕소 농도 분포에 큰 영향을 미치게 되는 것을 알 수 있었다. 200 eV 붕소 이온 주입에서 붕소 이온의 채널링 현상은 분포에 거의 영향을 미치지 못하기 때문이다. 그러나, 500 eV이상 1 keV이하의 극 저 에너지

지 붕소 이온 주입에서는 붕소의 채널링 현상이 중요하게 고려되어야 함을 알 수 있다.

마이크로 칩 기술이 나노미터 크기 시대로 들어감에 따라, 물리적인 이해는 더욱 중요하게 되고 있다. 이러한 나노기술 시대(nano-technology era)에서는 원자 단위의 연구가 반도체 소자 제조 공정 시뮬레이션의 기초가 될 것이다.

참 고 문 헌

- [1] Kenjiro SUGIO, Yoshiharu SHIMOMURA and Tomas D. de la RUBIA, "Computer Simulation of Displacement Damage Cascade Formation near Sigma 5 Twist Boundary in Silver", JPSJ, vol. 67, n3, pp. 882 (1998).
- [2] T. D. de la Rubia, N. Soneda, M.J. Caturla, and E.A. Alonso, "Defect production and annealing kinetics in elemental metals and semiconductors", J. Nuclear Materials, 251, pp. 13 (1997).
- [3] D.J. Bacon, A.F. Calder, and F. Gao, "Defect production due to displacement cascades in metals as revealed by computer simulation", J. Nuclear Material, 251, pp. 1 (1997).
- [4] R.E. Stoller, "Point defect survival and clustering fractions obtains from molecular dynamics simulations of high energy cascades", J. Nuclear Materials, 233-237, pp. 999 (1996).
- [5] H.L. Heinisch, and B.N. Singh, "Stochastic annealing simulation of differential defect production in high energy cascades", J. Nuclear Materials, 232, pp. 206 (1996).
- [6] T.D. de la Rubia, J.M. Perlado, and M. Tobin, "Radiation effects in silicon carbide: High energy cascades and damage accumulation at high temperature", J. Nuclear Materials, 233-237, pp. 1096 (1996).
- [7] M.J. Caturla, T.D. 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 54, pp. 16683 (1996).
- [8] 강정원, 손명식, 황호정, "GSI 소자 개발을 위한 극 저 에너지 이온 주입에 대한 분자 역학 시뮬레이션", 전자공학회 논문지 D, 35, pp. 230 (1998)
- [9] "National Technology Roadmap for Semiconductors", SIA (1994).
- [10] Alan Hinchliffe, "Modelling Molecular Structures", John Wiley & Sons (1996).
- [11] M. Parrinello, "From Silicon to RAN: The Coming of Age of *AB INITIO* Molecular Dynamics", Solid State Communications, 102, pp. 107 (1997).
- [12] N.E.B. Cowern, et al., "Low Energy Implantation and Transient Enhanced Diffusion: Physical Mechanism and Technology Implications", MRS vol. 469, pp. 256 (1997).
- [13] G. Hobler, et al., "Modeling of Ultra-Low Energy Boron Implantation in Silicon", IEDM 97, pp. 489 (1997).
- [14] K. Nordlund, "Molecular dynamics simulation of ion ranges in the 1-100keV energy range", Comp. Mat. Sci. 3, pp. 448 (1995).
- [15] M.B. Bazant, E. Kaxiras, and J.F. Justo, "Environment Dependent Interatomic Potential for Bulk Silicon", Phys. Rev. B 56, pp. 8542 (1997). <http://cmtek2.harvard.edu/software/EDIP>, <http://cmtek2.harvard.edu/~bazant/thesis>.
- [16] F.H. Stillinger and T.A. Weber, "Computer simulation of local order in condensed phases of silicon", Phys. Rev. B 31, pp. 5262 (1985).
- [17] Gartner et. at., "Round robin computer simulation of ion transmission through crystalline layers", NIM B 102, pp. 183 (1995).
- [18] "Atomic and Ion Collisions in Solids and at Surfaces: Theory, Simulation and Application", edited by Roger Smith, Cambridge Univ. Press. Cambridge (1997).
- [19] "Computer Simulation of Liquids", edited

- by M.P. Allen and D.J. Tildersley, Clarendon Press, Oxford. (1985).
- [20] M.W. Finnes, "Atomics Energy Authority Report No. AERE-13182" (1988).
 - [21] N.W. Ashcroft, and N.D. Mermin, ch.4 of "Solid State Physics", Saunders, Philadelphia. (1976).
 - [22] P.Hohenberg, and W. Khon, "Inhomogeneous Electron Gas", Phys. Rev. 136, pp. B864 (1964); W. Khon and L.J. Sham, "Self-Sonsistent Equations Including Exchange and Correlations Effect", Phys. Rev. 140, pp. A1133 (1965).
 - [23] K.C. Pandey, Phys. Rev. Lett. 57, pp. 2287 (1992).
 - [24] Y. Bar-Yam and J.D. Joannopolous, Phys. Rev. Lett. 52, pp. 1129 (1984).
 - [25] P.J, Kelly and R. Car, Phys. Rev. 45, pp. 6543 (1992).
 - [26] H. Seong and L.J. Lewis, Phys. Rev. B 53, pp. 9791 (1996).
 - [27] E. G. Song, E. Kim, and Y.H. Lee, Phys. Rev. B 48, pp. 1486 (1993).
 - [28] L. Colombo, M. Tang, T. Diaz de la Rubia, and F. Cargononi, Physica Scripta. T66, pp. 207 (1996).
 - [29] E. Chason st al., J. Appl. Phys. 81 (10), 6513 (1997).
 - [30] P. J. Bedrossian, M. J. Caturla, and T. D. de las Rubia, Appl. Phys. Lett. 70 (2), 176 (1997).
 - [31] T. D. de la Rubia, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B 120 (1996).
 - [32] P.E. Blochl, E. Smargassi, R. Car, D. B. Laks, W. Andreoni, and S.T. Pantelides, Phys. Rev. Lett. 70, 2435 (1993).
 - [33] T. D. de la Rubia, and M.-J. Caturla, "Atomic scale simulations of arsenic ion implantation and annealing in silicon", ECS Proceeding vol. 96-4, pp. 429 (1996).

저 자 소 개

姜 正 遠(正會員)

1973년 3월 6일생. 1995년 2월 중앙대학교 전자공학과 졸업(공학사). 1997년 8월 중앙대학교 전자공학과 공학 석사. 1997년 9월 ~ 현재 중앙대학교 전자공학과 공학 박사과정. 주관심분야는 반도체 공정 시뮬레이션, 분자역학 및 나노소자 시뮬레이션 등임

康 裕 碩(正會員)

1961년 5월 3일생. 1996년 중앙대학교 공과대학 전자공학과 졸업(학사). 1998년 중앙대학교 대학원 전자공학과 졸업(석사). 1992년 2월 ~ 1993년 5월 Univ. of Arizona, Tucson, USA 수학. 1995년 3월 ~ 현재 중앙대학교 전자공학과 박사과정. 주관심분야는 반도체 공정 및 소자 물리, 비파괴 3차원농도 측정 실험 및 시뮬레이션 등임

孫 明 植(正會員) 第 34卷 D編 第 5號 參照

卞 起 良(正會員)

1967년 8월 29일생. 1991년 2월 중앙대학교 전자공학과 졸업. 1995년 2월 중앙대 대학원 전자공학과 석사. 1995년 9월 ~ 현재 중앙대학교 전자공학과 박사과정. 주관심분야는 반도체 공정 및 소자 물리, 확산 공정 모델링 및 시뮬레이션 등임

黃 好 正(正會員) 第 34卷 D編 第 5號 參照