

論文2000-37SD-10-1

기가 비트급 소자 제작을 위한 3차원 몬테카를로 극저 에너지 이온 주입 모델링

(Modeling of 3D Monte Carlo Ion Implantation in the Ultra-Low Energy for the Fabrication of Giga-Bit Devices)

潘用瓚*, 權五燮**, 元太映**

(Yong Chan Ban, Oh Seob Kwon, and Tae Young Won)

요 약

소자의 크기가 딥 서브 마이크론 이하로 작아짐에 따라 극저 에너지 이온 주입의 정확한 모델링은 중요함을 더하게 되었다. 본 논문에서는 이체 충돌 근사(Binary Collision Approximation)에 기반을 둔 3차원 몬테카를로 이온 주입 시뮬레이터를 개발하였다. 이를 위하여, 저 에너지 이온 주입에 있어 이체 충돌 근사 방법의 제한 요소인 전자 에너지 정지력에 대한 모델을 개선하였고, 다중 충돌 계산을 위한 모델을 적용하였다. 계산된 이온 주입 도펀트 분포 및 결함 분포는 실제 실험치와 일치함을 확인하였다. 또한, 3차원 이온 주입 시뮬레이션에 있어 계산 시간의 효율을 극대화하고자, 본 연구에서는 이온 분포 복사법(Ion Distribution Replica Method)을 개발하였고, 복잡한 토폴로지를 갖는 다층 레이어의 이온 주입 공정에 있어 빠른 수행 시간 및 결과의 정확성을 확인하였다.

Abstract

A rigorous modeling of ultra-low energy implantation is becoming increasingly more important as devices shrink to deep submicron dimensions. In this paper, we have developed an efficient three-dimensional Monte Carlo ion implantation model based on a modified Binary Collision Approximation(BCA). To this purpose, the modified electronic stopping model and the multi-body collision model have been taken into account in this simulator. The dopant and damage profiles show very good agreement with SIMS(Secondary Ion Mass Spectroscopy) data and RBS(Rutherford Backscattering Spectroscopy) data, respectively. Moreover, the ion distribution replica method has been implemented into the model to get a computational efficiency in a 3D simulation, and we have calculated the 3D Monte Carlo simulation into the topographically complex structure.

I. 서론

소자의 크기가 서브하프 마이크론 이하로 감소함에 따라, 이온 주입된 도펀트의 3차원 분포에 대한 정확

* 正會員, (주)실리콘테크 부설연구소

(R&D Team, Silicon Tech Ltd.)

** 正會員, 仁荷大學校 電子電氣컴퓨터工學部

(Div. of Electrical and Computer Eng. INHA University.)

* 본 연구는 1999년도 인하대학교 교내 연구비의 지원으로 수행되었습니다.

接受日字:1999年 9月6日, 수정완료일:2000年8月25日

한 예측 및 제어는 소자의 설계 및 제작상 매우 중요한 요소가 되었다. 이러한 3차원적 분포의 예측을 위해서, 이온 주입 시뮬레이터는 마스크의 형상 및 이온 주입 방향에 따른 shadow 효과 및 측면 산란 등의 효과를 고려하여 계산되어야 하며^[1], 입사되는 경사각 및 회전각에 따라 접합 깊이 및 이온 분포의 형태가 달라지므로 3차원 구조에서 이온의 입사각에 따른 분포의 변화가 고려되어야 한다^[2].

또한, 수평 및 수직 길이가 감소하게 되므로 이온 주입시 저 에너지를 사용하여 보다 얇은 접합 깊이와 최소 측면 분포를 얻어야 하고, 이온 주입 후의 격자 손상 보상을 위한 급속 열처리 공정(RTA: Rapid

Thermal Annealing) 및 이온 주입 후 공정들에서의 열적 확산을 최소화시킬 필요가 있다^[3-4]. 이러한, 정교한 제어가 필요한 미세 공정들에 있어서의 이온 주입 시의 불순물 분포는 열 확산(thermal diffusion)없이 그대로 완성된 소자에 강한 영향을 끼치게 되므로, 이온 주입 시의 불순물 깊이 분포와 이에 따른 이온 주입 과정에서 격자 손상 정도에 대한 정보를 정확히 예측할 필요가 있다. 특히, 이온 도즈에 따른 격자 손상 정도에 대한 정확한 정보를 이용해 이온 주입 시의 불순물 분포를 예측할 수 있다면 이온 주입 과정에서 발생하는 틸새(interstitial)-결공(vacancy)간의 자체-어닐링 효과(self-annealing effect)의 물리적 이해와 모델링 및 이온 주입 공정후의 제조 공정 중에 발생할 수 있는 열 확산에 의한 불순물 재 분포에 대한 보다 정확한 열확산 메커니즘을 규명할 수 있고, 이에 따른 불순물 재분포를 정확히 예측할 수 있게 하여 미세 소자의 특성을 분석하는데 있어서 보다 중요한 정보를 제공할 수 있을 것으로 기대된다.

3차원 이온 주입 시뮬레이션의 경우, 반도체 소자가 극소형화 되어가고 있는 시점에서 3차원 구조 효과에 따른 불순물 및 결함 분포를 예측 분석하고, 이에 대한 정보를 실제 공정에 제공함으로써 소자 기술 및 개발에서의 어려움을 해결하는데 기여할 수 있으리라 여겨진다. 3차원 시뮬레이션의 어려움은 넓은 3차원 구조 영역에서 통계 분포를 얻기 위해 계산에 이용되는 입자 수 증가에 기인한다. 또한, 반동(recoil)되어 이동하기 시작하는 결함 캐직까지도 계산에 포함시키는 경우에는 물리적으로 타당한 대안이 필요하다. 즉, 정확성과 효율성 두 가지를 만족시켜야 한다.

단결정 실리콘의 방향성을 고려한 몬테카를로 이온 주입 시뮬레이션 코드로는 IMSIL 코드^[5] 및 Crystal-TRIM^[6] 등이 상용화된 ISE-DIOS 공정 시뮬레이터^[7], UT-MARLOWE 코드^[4, 8-9]를 2차원으로 확장시킨 TOMCAT^[10], 3차원 이온 주입 시뮬레이터인 TRICSI^[11], 2차원 상용 공정 시뮬레이터인 TSUPREM 및 Silvaco SUPREM 등이 있다.

2차원 상용 시뮬레이터인 TSUPREM 및 Silvaco SUPREM에서의 실리콘 방향성을 고려한 이온 주입 공정에 대한 신뢰성 및 예측성 검증은 1차원에 의해 이루어지며, 극 저 에너지 이온 주입을 위한 검증 및 다차원 효과를 보기 위한 검증은 이루어지지 않은 실정이다. UT-MARLOWE 코드는 5keV 이하의 극 저

에너지 이온주입 계산 결과에 있어 매우 높은 신뢰성을 갖는 것으로 알려져 있으며^[12], UT-MARLOWE를 2차원으로 확장하여 이온 주입한 문헌^[10]이 최근에 발표된바 있다. ISE틀에서 제공하는 DIOS 공정 시뮬레이터의 이온 주입 코드는 계산의 효율성에 있어서 비교적 뛰어난 장점을 보이지만, 정확성의 확보 및 예측성에 있어서 일관적이고 물리적이지만 못한 실정이다. 또한, TRICSI 코드는 3차원 이온 주입 공정에 대한 비교적 빠르고 정확한 시뮬레이션을 수행하나, 다층 구조 및 표면 단차가 있는 구조의 적용은 어려운 실정이다.

본 연구에서는 비교적 정확한 수행 능력을 지니는 MARLOWE 코드^[13]를 모체로 하여, 3차원 다층 구조의 대면적 시뮬레이션 영역에서 빠른 수행 시간을 갖는 이온 주입 시뮬레이터를 개발하였다. 또한, 선행 문헌을 바탕으로 하여 5keV 이하의 극 저 에너지 이온 주입 모델을 추가하였고, 이온 주입시의 손상 효과를 모델링하여 시뮬레이션하였으며, 이들 결과를 실제 실험 결과인 SIMS(Secondary Ion Mass Spectroscopy) 및 RBS(Rutherford Backscattering Spectroscopy) 결과와 비교하였다. 본 연구에서 개발한 이온 주입 시뮬레이터는 3차원 공정 시뮬레이터인 3D-SURFLER^[14]의 한 모듈로서 개발되었다.

II. 3차원 극 저 에너지 이온주입 모델

1. 극 저 에너지 이온주입을 위한 전자 정지력 모델
고체 내에서 이온의 상호 작용은 동시에 수 만개의 원자간 상호 작용을 포함하므로 매우 복잡한 전형적인 다원자간 시스템이다. 이러한 복잡한 문제를 처리하기 쉽도록 한번에 한 쌍의 원자간 상호 작용만을 고려하고 더 나아가 전자간 상호 작용과 양전하 원자핵간의 상호 작용을 분리한다. 이것은 이체 충돌 근사(BCA: Binary Collision Approximation)에서 기본적인 가정이다. 다시 말하면, 이체 충돌 근사는 다음 가정을 필수적으로 포함하고 있는 것이다. 즉, 핵 정지력과 전자 정지력은 무시할 정도의 작은 상호 작용을 하며(서로 독립적이며), 여러 원자간 상호작용은 연속된 두 원자간 상호작용으로 모델링 된다. 또한, 움직이는 전자의 전위 에너지는 운동 에너지에 비해 작으므로 무시할 수 있다. 따라서, 입자들은 핵 충돌에서 불연속적인 양으로 에너지를 잃고 전자의 상호작용으로 연속적

인 값으로 에너지를 잃게된다.

이체 충돌 근사 방법에서는 전자 정지력이 이온 궤적에 주는 미세한 영향은 무시하고 있으며, 간단히 무산란 운동으로 정의한다. 이런 가정은 충돌에서의 산란각이 작을 경우에 유효하나, 수 keV의 낮은 에너지를 가진 이온(특히, 붕소와 같은 가벼운 이온의 경우)의 운동에서는 산란각이 더욱 커지며, 이러한 현상은 전자 정지력의 계산에 있어 중대한 오차를 발생시킨다.

본 연구에서는 전자 손실을 모델링하기 위해 충돌간 비탄성 손실과 충돌과정에서의 비탄성 손실을 고려하여 적용하였다. 충돌간 비탄성 손실은 비 국부(non-local) 전자 정지력이라고도 하는데, 이 힘의 기본 원리는 다음과 같다. 단결정 실리콘을 통과하는 이온들은 몇 가지 원인으로 인한 전기적 반발력을 받는다. 핵 정지력을 일으키는 차폐 쿨롱 전위에 더해져 이온의 전기장은 주변 결정에서 전자들의 부분적인 위치 변화를 일으킨다. 이러한 위치 변화의 결과로 이온의 속도에 반대 방향인 극성을 띤 전기장을 만드는 순수한 다이폴 모멘트가 생긴다. 유도된 전기장의 결과로 이온에 가해지는 힘을 비 국부 전자 정지력이라고 한다. 본 논문에서는 낮은 에너지를 가진 입자의 비 국부 전자 정지력을 계산하기 위해서 Morris^[15-16] 모델을 적용하였다.

비 국부 전자 정지력 모델에 대한 방정식은 식(1)과 같다.

$$\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi q^4 \cdot \rho}{\epsilon_0^2 m v^2} \cdot L. \tag{1}$$

여기서, m은 전자질량, v는 전자의 속도, ρ는 이온 지점에서 전자 밀도를 나타낸다.

$$L = \begin{cases} k(x) \left(\frac{v}{v_F}\right)^3, & v < 1.5v_F \\ \ln\left(\frac{2mv^2}{(\hbar^2 \omega_c^2 + E_g^2)^{1/2}}\right) - \left(\frac{3}{5}\right)\left(\frac{v_F}{v}\right)^2 - \left(\frac{3}{14} + \frac{x}{3}\right)\left(\frac{v_F}{v}\right)^4, & v \geq 1.5v_F \end{cases} \tag{2}$$

여기서, $\chi^2 = 1/(\pi k_F a_0)$, a_0 는 보어 반경, k_F 는 페르미 파동수(fermi wave number), 그리고 v_F 는 페르미 속도를 나타낸다. χ 는 물질에 대해 고정된 수이고, E_g 는 감마 점(gamma point-4.8 eV)에서 실리콘의 밴드갭(bandgap)을 나타낸다.

충돌 과정에서의 비탄성 손실은 국부(local) 전자

정지력이라고도 하는데, 이 힘은 다음의 원리로 발생된다. 비 국부 전자 정지력의 결과로 이온이 실리콘 원자에 접근할 때, 이온의 전자 구름은 실리콘 원자의 핵 주위 전자와 상호 작용을 일으킬 수 있다. 이온의 전자는 자신의 운동량의 일부분을 목표물 전자들에 전달할 수 있고, 이로 인해 이온의 전체 에너지는 감소한다. 이러한 에너지 전이 발생에 의해 이온에 작용하는 힘을 국부 전자 정지력이라 한다. 비 국부 전자 정지력과는 달리 이 힘은 실리콘 원자에 가까이 접근할 때만 이온에 작용하며, 산란각에 영향을 준다.

본 연구에서는 국부 전자 정지력으로 Firsov^[17]와 Obradovic의 이론^[12]을 바탕으로 적용하였다. Firsov의 이론에 의하면, 그림 1에서 나타낸 바와 같이 이온의 전자로부터 타겟 전자로의 에너지 전달은 두 원자 사이의 전자 전달에 의해서 발생한다. 전자의 궤도(orbital) 속도(v)는 이온 자체의 속도에 해당하는 전자들의 평균속도보다 더 크다고 가정한다. 이때, 이온으로부터 타겟으로 전달되는 전자는 식(3)에 해당하는 운동량을 전달한다.

$$P = m_e (V_{target} - V_{ion}) \tag{3}$$

여기서, m_e 는 전자의 질량, V_{target} 은 타겟 전자의 평균속도, V_{ion} 은 이온 전자의 평균 속도를 나타낸다. 이온에서 타겟으로의 전자 전류 밀도는 전자의 궤도 속도와 전자의 국부적인 농도에 비례한다. 그러므로, 이온에서 타겟으로 전달된 힘은 식(4)와 같다.

$$\vec{F} = m_e (V_{target} - V_{ion}) \cdot \int \frac{nv}{4} ds \tag{4}$$

여기서, v는 전자의 궤도 속도, n은 전자 밀도 분포를 나타내며, 적분 과정은 이온과 타겟이 교접하고 있는 전면에 걸쳐 수행된다.

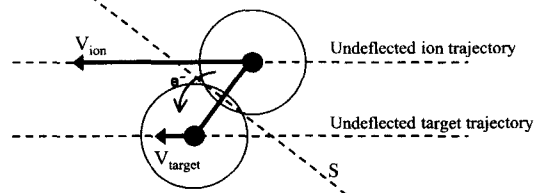


그림 1. 이온과 타겟 원자의 충돌과정에서의 전자 전달 Fig. 1. Electron transfer during the ion-target collision.

2. 몬테카를로 다중 충돌 알고리즘

이체 충돌 근사 방법에서 이온은 하나의 타겟 원자와 충돌을 일으키고 에너지 전달량만큼의 에너지를 잃는다. 이온이 2개 이상의 타겟 원자와 동시에 충돌할 경우 이온과 좀더 가까운 원자와의 충돌 계산만을 수행하고 다른 원자와의 상호 작용은 무시한다. 그러나, 저 에너지로 운동하는 이온의 경우 이러한 가정은 무시할 수 없는 오차를 발생시킨다. 이러한 문제점을 해결하기 위해서, 본 연구에서는 이체 충돌 근사 방법을 바탕으로한 다중 충돌 알고리즘을 적용하였다. 즉, 이온과 반응하는 총 상호 전위는 타겟 원자 개개의 상호 전위의 선형 결합으로 표현된다.

본 연구에서는 Robinson의 알고리즘^[15]에 근간을 두어 3개 입자, 즉 2개의 타겟 원자와의 다중 충돌 효과를 고려하였다. 2개의 타겟 원자와 이온의 충돌 핵정지력이 E_1 와 E_2 으로 정의된다면, 중첩 원리에 의한 다중 충돌 계산의 최종 핵 정지력은 식(5)와 같이 표현된다.

$$E = \frac{E_1}{\exp\left(\frac{b-b_0}{0.1}\right)+1} + \frac{E_2}{\exp\left(\frac{b_0-b}{0.1}\right)+1} \quad (5)$$

여기서, b 는 충돌 변수(impact parameter)이고, b_0 는 2개의 타겟 원자에 대한 가중치가 적용된 충돌 변수이다.

3. 이온 주입 격자 손상 모델

입사된 이온이 실리콘 타겟을 통과하는 동안, 이온은 수많은 타겟 원자와 충돌할 것이고 충돌로 인해 많은 수의 타겟 원자는 격자 위치로부터 움직일 것이다. 타겟 원자는 격자의 위치를 떠나 결공(vacancy)을 발생시키고, 계속해서 다른 원자와의 산란 과정을 겪게되며, 그의 에너지를 모두 잃게되면 자신은 틈새(interstitial)가 된다. 또한, 상온에서의 이온 주입시 웨이퍼 온도에 의한 자체-어닐링(self-annealing)이 발생하여, 결공-틈새의 재결합(recombination)으로 인한 점결합 소멸(annihilation) 효과가 발생한다.

점결합의 발생이 누적되면서 단결정 실리콘은 점차적으로 비정질화되고, 극부적으로 비정질화된 영역(amorphized pocket)들이 확장 결합하여 비정질층(amorphized layer)을 형성하게 된다. 이러한 이온 주입 과정에서의 격자 손상을 모델링하기 위해서, 본 연구에서는 개선된 Kinchin-Pease^[18]을 바탕으로하여

Tian^[4]와 Wang^[19]의 모델을 적용하였다.

충돌 과정에서 전이된 에너지(E)는 개선된 Kinchin-Pease 식에 의해 식(6)과 같이 점결합의 수로 변환된다.

$$n = \frac{k \cdot E}{2E_d} \quad (6)$$

여기서, $k=0.8$ 로 상수이고, E_d 는 격자 원자가 이탈되기 위해 필요한 임계 에너지(15 eV)이다.

한 이온의 주입 과정에서 점결합의 생성 및 재결합이 수행되며, 이때 한 반동(recoil) 궤적이 만든 결함의 증분은 식(7)과 같다.

$$\Delta n = n \cdot f_{rec} \cdot \left(1 - \frac{N}{N_a}\right) \quad (7)$$

여기서, N 은 틈새의 농도와 같다고 가정된 결공의 극부 농도이고, N_a 는 결함 포화 농도로서 실리콘 밀도의 10%로 정의하였다. f_{rec} 는 재결합 상수이고, B, P, As, BF₂에 대해 각각 0.1, 0.4, 0.6, 0.6으로 설정하였다.

디채널링(dechanneling)을 고려하기 위해 식(8)과 같이 점결합과 충돌할 확률식을 사용하였으며, 틈새 위치를 아령 형태(dumbbell configuration)로 위치시키고, 나머지 구조는 결정 형태를 그대로 유지시켜 고려하였다.

$$P = \gamma \frac{N}{N_a} \quad (8)$$

여기서, γ 는 상수이다.

4. 계산 시간의 효율을 극대화한 3차원 이온 주입 모델-이온 분포 복사법

몬테카를로 이온 주입 모델은 시뮬레이션되는 개개의 이온 주입 궤적을 추적하게 되므로 넓은 3차원 영역에서는 통계적 정확성을 유지하기 위해 기하급수적인 시뮬레이션 입자를 필요로 한다. 또한, 3차원 영역으로의 확장은 많은 메모리를 요구하게 되는 데, 이는 3차원에서의 확장이 용이하지 않음을 반증한다^[20-21]. 1차원 시뮬레이션의 경우 통계적 잡음을 고려하여 비교적 정확한 계산을 수행하기 위해서 약 10,000개 정도의 입사 이온이 필요하게 되며, 2차원 및 3차원 시뮬레이션에서 채널링 tail을 관찰하기 위해 가상 궤적 발생법(trajecory split method)^[22]을 이용하게 되었다. 지금까지 발표된 문헌에서는 가상 궤적 발생법을 적용하여 1차원 및 2차원 시뮬레이션을 수행하였으나, 본

연구에서는 이를 3차원으로 확장하여 넓은 시뮬레이션 영역에서도 큰 계산 효율성을 갖는 알고리즘을 개발하였다. 또한, 평탄한 실리콘 층 뿐만 아니라, 증착, 식각 공정이 적용된 복잡한 토폴로지(topology)를 갖는 구조에 대해서도 효율적으로 시뮬레이션할 수 있는 모델을 개발하였다.

그림 2는 붕소 이온을 30keV, 도즈는 $5 \times 10^{14}/\text{cm}^2$ 으로 3,000개의 시뮬레이션 입자를 수직 입사시킨 3차원 시뮬레이션 결과이다. 모두 같은 크기의 점 좌표로 표시되어 있어 초기 시뮬레이션 개수보다 더욱 많은 입자가 분포하는 것으로 여겨지나, 가상 궤적 발생법을 적용한 결과로서 깊은 지점에 위치하는 이온의 가중치는 낮은 값을 갖게 된다. 이러한 결과를 이용하여 본 연구에서는 시뮬레이션의 최소화를 위해 그림 3에서 보는 바와 같이 이온 분포 복사법(ion distribution replica method)을 도입하였다.

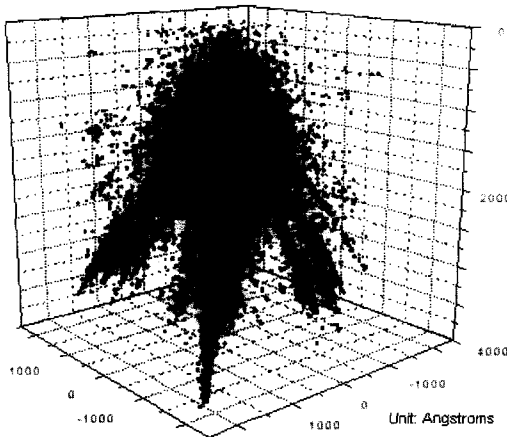


그림 2. 3,000개의 이온을 30keV의 에너지로 단위 영역에 주입시킨 3차원 결과 : 시뮬레이션 창은 $54.3095 \text{Å} \times 54.3095 \text{Å}$ 이고, 가상 궤적 발생법을 적용시켜 깊게 분포한 이온의 가중치는 표면보다 낮은 값을 가지고 있다

Fig. 2. The 3D ion distribution for boron implants at an energy of 30keV : We use 3,000 ions to simulate the implants in a $54.3095 \text{Å} \times 54.3095 \text{Å}$ window, and the trajectory split method to reduce a statistical noise.

즉, 그림 2와 같이 계산된 3차원 결과를 이용하여, 이전에 입사된 환경과 동일함을 판별한 다음, 조건이 합당하다면 계산되어 버퍼에 저장된 결과를 그대로 적용하는 방법이다. 그림 3의 지점 ①~⑤는 시뮬레이션하고자 하는 영역의 환경이 동일하므로 한번의 계산

을 수행한 후 반복해서 다른 지점에도 적용하게 된다. 만약, ⑥ 지점을 계산하게 된다면 다시 다른 시뮬레이션을 수행하고 버퍼에 수행 결과를 저장하여 이후에 같은 조건의 토폴로지 환경이 발견될 때 적용하게 된다. 이러한 알고리즘을 이용하여 시뮬레이션 영역이 $10,000 \text{Å} \times 10,000 \text{Å}$ 인 창에 시뮬레이션 오차를 최소화 하는 복사 간격(200Å)으로 계산하였을 경우에 그림 2의 수행 시간(40분)을 기준으로 약 90분 정도가 소요되었다. 그러나, 이온 분포 복사법을 적용하지 않고 $10,000 \text{Å} \times 10,000 \text{Å}$ 영역에 이온 주입하였을 경우 시뮬레이션 시간은 대략 50×50 배(100,000분)로 현실적이지 못한 수행 시간을 소요하게 된다.

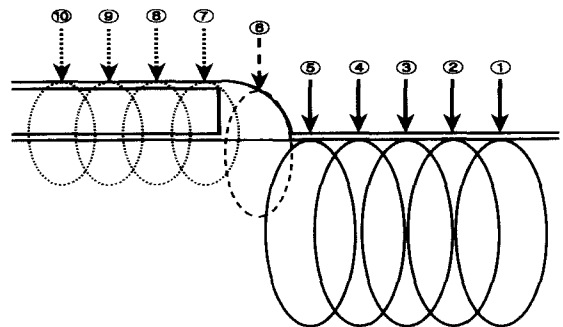


그림 3. 이온 분포 복사법의 원리를 설명하는 개념도
Fig. 3. A plot describing the definition of the ion distribution replica method.

Ⅲ. 극 저 에너지 이온주입 및 3차원 시뮬레이션

그림 4는 본 논문에서 제안한 전자 에너지 모델 및 다중 충돌 알고리즘을 이용하여, 붕소 이온에 대해 도즈 $3 \times 10^{13}/\text{cm}^2$ 에서 경사각 7° , 방위각 0° , 에너지 1keV 및 2keV로 각각 입사시켰을 때, 깊이에 따른 도펀트의 분포도이다. 이온의 입사 에너지가 5keV 미만인 낮은 에너지로 이온 주입한 실험 데이터의 부족으로 결과를 여러 도펀트에 대해 비교하지 못하였고, 본 논문에서는 Obradovic 논문^[12]의 SIMS 데이터를 이용해 본 연구의 결과와 비교하였다. 극 저 에너지 분포는 실리콘 표면에 매우 얇게 존재하므로, 표면 산화막의 두께에 매우 많은 영향을 받게 된다. 따라서, 입사 도즈량에 따라서 표면 산화막의 두께를 적절히 제어해 주었는데, 본 연구에서는 $2 \times 10^{12}/\text{cm}^2 \sim 1 \times 10^{15}/$

cm² 도즈 범위에 대하여 표면 산화막의 두께를 5Å ~ 20Å의 범위로 적절히 제어하였다. 그림 4의 결과는 표면 산화막의 두께를 5Å으로 설정하였다. 그림 4에서 나타난 바와 같이 본 연구에서 제안된 극 저 에너지 이온 주입 결과는 SIMS 데이터와 일치하는 것을 볼 수 있다.

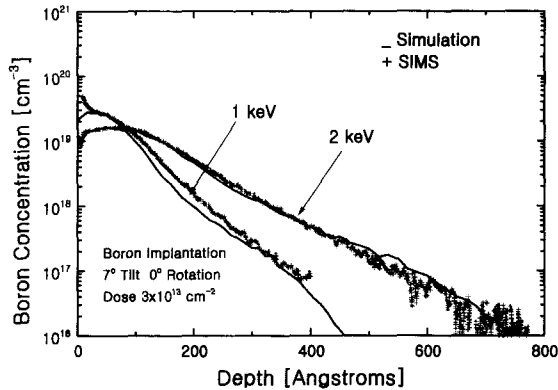


그림 4. 저 에너지 붕소 이온 주입 결과와 SIMS^[12]의 비교: 입사 이온의 도즈량은 3×10¹³/cm², 경사각 7°, 회전각 0°, 표면 산화막의 두께는 5Å이다
 Fig. 4. A plot showing the comparison of the simulation results with SIMS^[12] profiles for 1keV and 2keV boron implants at a dose of 3×10¹³/cm², for 7° tilt and 0° rotate implants. The simulated oxide thickness is 5Å.

그림 5는 비소 이온에 대해 도즈 6×10¹²/cm², 에너지 2keV, 경사 입사각을 0°, 7°로 각각 변화를 주어 입사시켰을 때, 깊이에 따른 도펀트의 분포도이다. 일반적으로 저 에너지 이온주입에서 SIMS의 결과는 일치이온의 깊이 분해능(depth resolution)이 현저하게 나빠져서 웨이퍼의 표면쪽으로 실제결과와 오차가 발생된다. 그림 5의 결과는 표면 산화막의 두께를 5Å으로 설정하였으며, SIMS 데이터와 비교적 비슷한 분포를 가짐을 볼 수 있다. 그림 4의 결과와 비교해볼 때 비소의 원자 질량 및 반경은 붕소에 비해 크기 때문에 같은 에너지로 주입함에도 불구하고, 비소는 채널링 현상이 현저하게 감소함을 볼 수 있다. 또한, 도펀트 분포에서도 비소의 주입 분포는 붕소의 분포에 비해 급격한 경사 분포를 볼 수 있다. 게이트의 길이가 짧아짐에 따라서, 과도 증속 확산(TED: Transient Enhanced Diffusion) 및 역 단채널 효과(RSCE: Reverse Short Channel Effect), 또한 게이트 펀치

스루(punchthrough) 현상을 줄이기 위해서, 채널 보정용 불순물로서 붕소를 대신하여 무게가 무거운 이온 (Ga, In)의 이온 주입 연구^[23-24]가 활발히 진행되고 있는 실정이다.

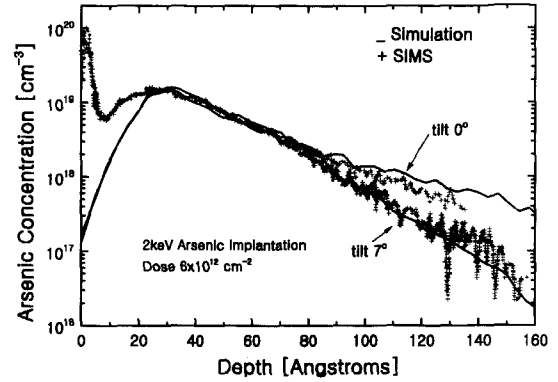


그림 5. 2keV 비소 이온 주입 결과와 SIMS^[12]의 비교: 입사 이온의 도즈량은 6×10¹²/cm²이다
 Fig. 5. A plot showing the comparison of the simulation results with SIMS^[12] profiles for 2keV arsenic implants at a dose of 6×10¹²/cm², for 0° tilt and 7° tilt implants.

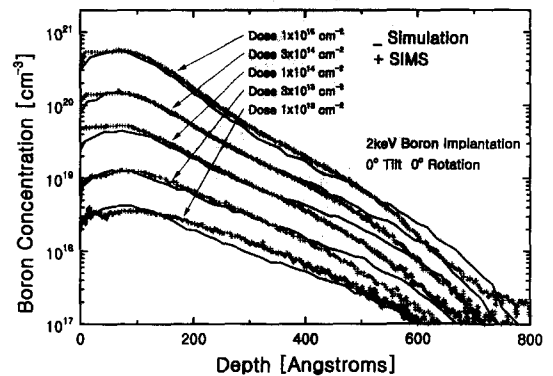


그림 6. 도즈 변화에 따른 2keV 붕소 이온 주입 결과와 SIMS^[12]의 비교
 Fig. 6. A plot showing the comparison of the simulation results with SIMS^[12] profiles for 2keV boron implants. The simulated oxide thickness is allowed to vary with dose.

그림 6은 도즈량을 1×10¹³/cm²~1×10¹⁵/cm²까지 변화시켜 가면서 2keV의 붕소 이온을 주입한 결과와 SIMS 비교도이다. 시뮬레이션 결과의 최적화를 위해서, 표면 산화막의 두께를 조절하였다. 즉, 도즈량이 1×10¹³/cm², 3×10¹³/cm²일 경우에는 5Å의 산화막을, 1×10¹⁴/cm²일 경우에는 8Å의 산화막을, 3×10¹⁴/cm²일

경우에는 12Å의 산화막을, $1 \times 10^{15}/\text{cm}^2$ 일 경우에는 17Å의 산화막을 각각 사용하였다. 몬테카를로 방식을 사용한 기존의 이온 주입 시뮬레이터에서는 도즈량이 클수록 시뮬레이션의 오차가 크게 발생하는 것을 볼 수 있었으나, 본 논문의 결과는 낮은 도즈량에서부터 높은 도즈량에 이르기까지 SIMS 결과와 일치하는 결과를 얻을 수 있었다.

그림 7은 50keV 에너지를 가진 비소 이온 및 65keV 에너지의 BF₂ 이온 주입 후의 결합 분포 결과이다. 결과에서 사용된 비소의 도즈량은 $1 \times 10^{14}/\text{cm}^2$ 이고, BF₂의 도즈량은 $5 \times 10^{14}/\text{cm}^2$ 이다. RBS^[4] 결과와의 비교를 위해서 높은 에너지와 도즈량으로 시뮬레이션하였고, 100%로 환산한 단위를 사용하였다. 본 논문에서 비정질층이 형성되는 최대 농도는 실리콘 농도의 10% 값으로 정의하였으며, 본 논문의 결과는 비정질층 두께 정보에 있어서 RBS 실험 데이터와 일치함을 확인하였다.

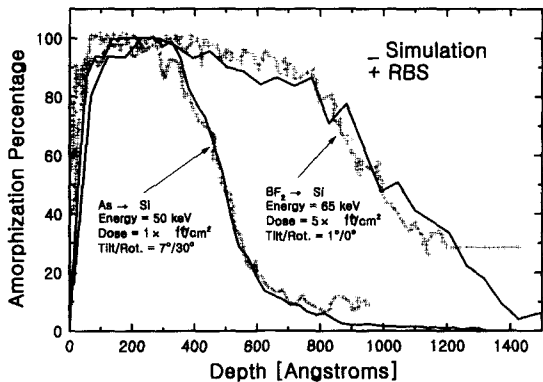
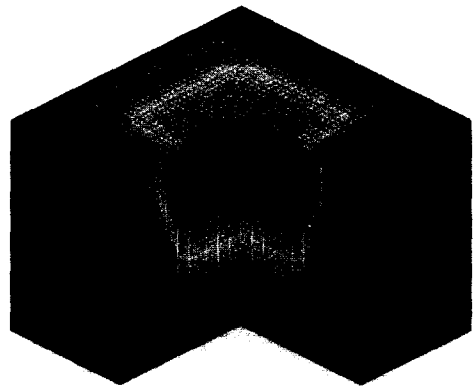


그림 7. 50keV 에너지를 가진 비소 이온 주입 및 65keV 에너지의 BF₂ 이온 주입 후의 RBS^[4] 결과 비교 : 비소의 도즈량은 $1 \times 10^{14}/\text{cm}^2$ 이고, BF₂의 도즈량은 $5 \times 10^{14}/\text{cm}^2$ 이다. 실험 데이터와의 비교를 위해서 높은 에너지와 도즈량으로 시뮬레이션하였다

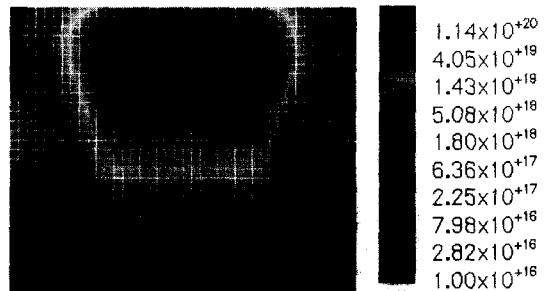
Fig. 7. A plot showing the comparison of the simulation results with RBS^[4] profiles for both As impurity at an energy of 50keV and a dose of $1 \times 10^{14}/\text{cm}^2$ and BF₂ impurity at an energy of 65keV and a dose of $5 \times 10^{14}/\text{cm}^2$.

그림 8은 본 논문에서 제안한 가상 궤적 발생법 및 이온 분포 복사법을 적용하여 구현한 3차원 도펀트 분포 및 2차원 단면도이다. 주입 이온으로 붕소 이온을 사용하였고, 입사 에너지 10keV, 경사각 0°, 회전

각 0°, 도즈량 $5 \times 10^{14}/\text{cm}^2$ 이다. 3차원 이온 주입을 위한 구조 형성은 3D-SURFILER를 이용하여 구현하였으며, 그림 8의 결과는 $4,000 \text{Å} \times 4,000 \text{Å}$ 인 전체 시뮬레이션 영역에 대하여 가운데 $2,000 \text{Å} \times 2,000 \text{Å}$ 인 영역만을 이온 분포 복사 간격 200Å으로 시뮬레이션한 결과이다. 셀방법^[14]을 사용한 구조 형성시 단위 셀의 크기는 $100 \text{Å} \times 100 \text{Å} \times 100 \text{Å}$ 이며, 본 계산에 소요된 총 시뮬레이션 시간은 SUN Ultra 10 환경에서 73분이 소요되었다. 이러한, 결과는 지금까지 보고된 다른 논문의 결과에 비해서 최대 5~10배 이상의 빠른 수행 시간을 보이는 것으로써, 3차원 이온 주입의 가장 큰 문제점인 계산 시간의 효율성 및 계산의 정확성을 동시에 만족시킬 수 있었다.



(a)

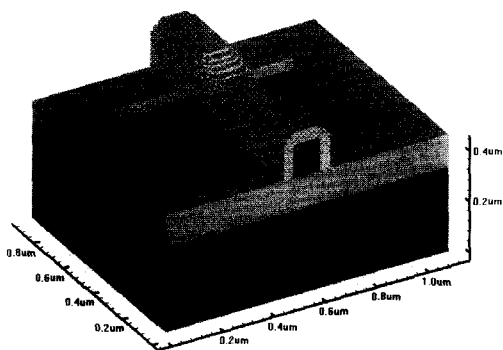


(b)

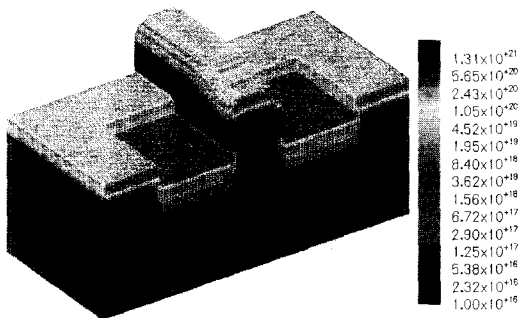
그림 8. 가상 궤적 발생법 및 이온 분포 복사법을 적용하여 구현한 3차원 도펀트 분포 및 2차원 단면도 : 10keV 에너지를 가진 붕소 이온을 도즈 $5 \times 10^{14}/\text{cm}^2$, 경사각 0°, 방위각 0°로 $2,000 \text{Å} \times 2,000 \text{Å}$ 인 영역에 이온 주입시켰다

Fig. 8. Simulation results of the 3D boron concentration and $\frac{1}{2}$ section view of the 3D profile at an energy of 10keV, dose $5 \times 10^{14}/\text{cm}^2$, tilt 0°, rotation 0°. The area of the implants region is $2,000 \text{Å} \times 2,000 \text{Å}$.

그림 9는 3D-SURFILER를 이용하여 연속 공정으로 구현한 $0.1\mu\text{m}$ 의 게이트 길이를 갖는 NMOS 트랜지스터의 구조 및 계산된 이온 주입 도펀트 농도의 분포이다. 그림 (a)의 결과는 이온 주입을 위한 전체 영역을 형성한 결과이며, $1.2\mu\text{m} \times 0.9\mu\text{m} \times 0.7\mu\text{m}$ 의 시물레이션 영역을 갖는다. 또한, 비소 이온의 소스/드레인 형성 이온 주입은 에너지 10keV , 도즈 $5 \times 10^{15}/\text{cm}^2$ 로 스페이서(spacer)를 형성한 후 전면에 걸쳐 수행되며, 그림 (b)의 결과는 그림 (a)의 단면도이다. 구조 형성 및 이온 주입을 위한 시물레이션 수행시간은 SUN unix Ultra-10에서 90여분이 소요되었으며, 본 논문에서 수행한 이온 주입 결과는 복잡한 토폴로지를 갖는 다층(multi-layer) 3차원 구조에 대하여 성공적으로 수행되었음을 볼 수 있다.



(a)



(b)

그림 9. $0.1\mu\text{m}$ 의 게이트 길이를 가지는 NMOS 트랜지스터의 구현과 이온 주입 결과 : 그림 (a)의 결과는 3D-SURFILER를 이용하여 형성되며, 그림 (b)의 결과는 10keV 의 에너지를 가진 비소 이온을 경사각 0° 로 이온 주입 시킨 결과이다

Fig. 9. The bird's eyes view and arsenic dopant distribution of $0.1\mu\text{m}$ NMOSFET at an energy of 10keV , dose $5 \times 10^{15}/\text{cm}^2$, tilt 0° .

IV. 결론

ULSI 반도체 미세 소자 제조에 있어 필수적인 극 저 에너지 이온 주입 공정을 모델링하고, 이를 빠른 시간안에 3차원으로 구현할 수 있는 모델을 제안하였다. 몬테카를로 저 에너지 이온 주입 시물레이션에 있어서, 이체 충돌 근사 방법의 오차를 줄이기 위해서, 개선된 전자 정지력 모델 및 다중 충돌 모델을 추가하였다. 또한, 이온 주입 후의 격자 결함 분포를 구현하기 위해서, 개선된 Kinchin-Pease 모델을 적용하였다. 본 논문에서 제안한 극 저 에너지 결과는 1keV 와 2keV 의 에너지를 갖는 붕소 이온 및 비소 이온에 대해 실험치와 비교하였으며 낮은 도즈량에서부터 높은 도즈량에 이르기까지 성공적으로 SIMS 측정치와 일치함을 확인하였다. 또한, 이온 주입 후의 격자 결함 결과는 결과의 비교를 위해서 높은 에너지 및 도즈량을 갖는 비소 및 BF_2 이온에 대해 수행하였고, 점결함 농도의 분포 및 비정질 정도에 있어 RBS 측정치와 근접한 결과를 확인하였다. 정확한 물리적 이론에 바탕을 둔 이온 주입 모델을 3차원으로 확장하기 위하여 본 논문에서는 이온 분포 복사법을 제안하였고, $0.1\mu\text{m}$ 의 게이트 길이를 갖는 NMOS 소자에 적용하여 빠른 수행시간 안에 비교적 정확한 시물레이션을 수행하였다. 제안된 극 저 에너지 이온 주입 모델 및 3차원 시물레이션 모델을 이용하여, 서브 하프 마이크론급 미세 소자의 시물레이션에 적용한다면 ULSI 소자 개발 비용 및 시간을 크게 단축시킬 수 있으리라 기대된다.

V. 참고 문헌

- [1] L. Gong, J. Lorenz, and H. Ryssel, "Direct Observation of the Mask Edge Effect in a Boron Implantation," Proceedings of the 20th European Solid State Device Research Conference(ESSDERC), pp. 93-96, 1990.
- [2] C. Park, K. M. Klein, A. F. Tasch, R. B. Simonton, and S. Novak, "A Comprehensive and Computationally Efficient Modeling Approach for Simulation of Boron Ion Implantation into Single-Crystal Silicon with Explicit Dose and Implant Angle Dependence," Proceedings of the 7th Inter-

- national Conference on the Numerical Analysis of Semiconductor Devices and Integrated Circuits(NASECODE), pp. 87-88, 1991.
- [3] J. F. Ziegler, *Handbook of Ion Implantation Technology*, North-Holland, 1992.
- [4] S. Tian, *Monte Carlo simulation of ion implantation damage process in silicon: arsenic, phosphorus, silicon, BF₂, and Boron implants*, Ph. D. Thesis, The University of Texas at Austin, 1997.
- [5] G. Hobler, "Monte Carlo simulation of two-dimensional implanted dopant distributions at mask edges," *Nucl. Inst. Meth. B*, vol. 96, pp. 155-162, 1995.
- [6] M. Posselt, B. Schmidt, C. S. Murthy, T. Feudal, and K. Suzuki, "Modeling of Damage Accumulation during Ion Implantation into Single-Crystalline Silicon," *J. Electrochem. Soc.*, vol. 144, no.4, pp. 1495-1504, 1997.
- [7] B. Schmidt, M. Posselt, N. Strecker, and T. Feudel, "Atomistic Simulation of Ion Implantation into Real 2D structures," *International Workshop on Challenges in Predictive Process Simulation (Chips'97)*, Germany, 1996.
- [8] S.-H. Yang et al., "An Accurate Monte Carlo Binary Collision Model for BF₂ Implants into (100)Single-Crystal Silicon," *Proceeding of the 4th International Symposium on Process Physics and Modeling in Semiconductor Technology*, pp. 481-494, 1996.
- [9] S. Tian, M. F. Morris, S. J. Morris, B. Obradovic, G. Wang, A. F. Tasch, and C.M. Snell, "A Detailed Physical Model for Ion Implant Induced Damage in Silicon," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 45, pp. 1226-1237, June 1998.
- [10] B. Obradovic, G. Balamurugan, G. Wang, Y. Chen, and A. F. Tasch, "Monte Carlo Simulation of Ion Implantation into Topographically Complex Structures," *IEEE IEDM Tech. Dig.*, pp. 513-516, 1998.
- [11] M. Son, J. Lee and H. 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] B. Obradovic et al., "Low Energy Model for Ion Implantation of Arsenic and Boron into (100) Single-Crystal Silicon," *Proceedings of SPIE, Microelectronic Device Technology*, vol. 3212, pp. 342-353, 1999.
- [13] M.T. Robinson and I.M. Torrens, "Computer simulation of Atomic Displacements Cascades in Solids in the Binary Collision Approximation," *Phys. Rev. B*, vol. 9, No. 12, pp. 5008-5024, 1974.
- [14] T. Won, "Three-Dimensional Modeling and Simulation of Dry Etching Process," *JKPS(Journal of The Korean Physical Society)*, vol. 33, pp.72-75, November 1998.
- [15] S. J. Morris, B. Obradovic, S. H. Yang and A. F. Tasch, "Modeling of Boron, Phosphorus, and Arsenic Implants into Single-Crystal Silicon over a Wide Range (Few keV to Several MeV)," *IEDM '96*, San Francisco, CA, pp. 721-724, 1996.
- [16] S. J. Morris, *Electronic stopping in single-crystal silicon from a few keV to several MeV*, Ph. D. Thesis, The University of Texas at Austin, 1997.
- [17] O. B. Firsov, "A qualitative interpretation of the mean electron excitation energy in atomic collision," *Journal of Experimental and Theoretical Physics (USSR)*, vol. 36, pp. 1517-1523, 1959.
- [18] M. J. Norgett, M. T. Robinson, and I. M. Torrens, "A proposed method of calculating displacement dose rate," *Nucl. Eng. Des.*, vol. 33, pp. 50-54, 1975.
- [19] G. Wang, S. Tian, M. Morris, S. Morris, B. Obradovic, G. Balamurugan, and A. Tasch, "A computationally efficient ion implant-

- ation model: modified Kinchin-Pease model," Microelectronics Device Technology, Austin, TX, USA: SPIE-Int. Soc. Opt. Eng., pp. 324-333, 1997.
- [20] 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.
- [21] M. Posselt, "3D modeling of ion implantation into crystalline silicon: influence of damage accumulation on dopant profiles," Nucl. Inst. and Meth. B, vol. 96, pp. 163-167, 1995.
- [22] S.-H. Yang, D. Lim, S. J. Morris, and A. F. Tasch, "Improved efficiency in Monte Carlo Simulation of ion implanted impurity profiles in single-crystal materials," Nucl. Inst. Meth. B, vol. 102, pp. 242-246, 1995.
- [23] P. Bouillon, F. Benistant, T. Skotnicki, G. Guegan, D. Roche, E. Andre, D. Mathiot, S. Tedesco, F. Martin, M. Heitzmann, M. Lerme, M. Haond, "Re-examination of Indium implantation for low power 0.1 μ m technology," IEEE IEDM Tech. Dig., pp. 897-900, 1995.
- [24] C. Caillat, S. Deleonibus, G. Guegan, S. Tedesco, B. Dal'zotto, M. Heitzmann, F. Martin, P. Mur, B. Marchand, F. Balestra, "65nm physical gate length NMOSFETs with heavy ion implanted pockets and highly reliable 2nm-thick gate oxide for 1.5V operation," 1999 Sim. on VLSI Tech., pp. 89-90, 1999.

 저 자 소 개

潘用瓚(正會員) 第35卷 D編 第5號 參照

1974년 7월 7일생. 1997년 인하대학교 전자재료공학과(공학사). 1999년 인하대학교 전자전기컴퓨터공학부 반도체전공(공학석사). 1999년~2000년 인하대학교 전자전기컴퓨터공학부 반도체전공 박사과정. 2000년~현재 (주)실리콘테크 부설연구소 전문연구원. 주관심분야는 반도체 공정 물리, 시뮬레이션, 반도체 장비 개발 등임

元太映(正會員) 第35卷 D編 第5號 參照

1959년 2월 21일생. 1981년 서울대학교 전자공학과(공학사). 1983년 한국과학기술원 전기 및 전자공학과(공학석사). 1989년 미국 University of Illinois at Urbana-Champaign 전자공학과(공학박사). 1989년~1990년 미국 State University of New York 조교수. 1990~1991년 삼성전자(주) 수석 연구원. 1991년~현재 인하대학교 공과대학 전자전기컴퓨터공학부 부교수. 주관심분야는 반도체 소자 및 공정 등임

權五燮(學生會員) 第37卷 SD編 第7號 參照

1972년 9월 18일생. 1997년 인하대학교 전자재료공학과(공학사). 1999년 인하대학교 전자전기컴퓨터공학부 반도체전공(공학석사). 1999년~현재 인하대학교 전자전기컴퓨터공학부 반도체전공 박사과정. 주관심 분야는 반도체 소자 및 공정, 시뮬레이션 등임