[논문] 열처리공학회지, 제13권 제4호(2000)
J. of the Korean Society for Heat Treatment, *Vol. 13, No. 4, (2000) pp. 259~264*

분자동력학적 방법에 의한 저 에너지 As 이온 주입에 따른 Si 기판의 결함 형성 거동에 대한 컴퓨터 모사 실험

鄭棟碩 · 朴炳道*
창원기능대학 재료학과
*창원기능대학 시스템개발 및 소재평가 센터

Computer Simulaton of Defect Formation Behaviors of Crystal-Silicon on the Low Energy Arsenic Implantation by Molecular Dynamics

Dong-Seok Chung and Byung Do Park
Dept. of Materials, Changwon Polytechnic College, Changwon 642-741
**Center for Materials Evaluation and System Development, Changwon Polytechnic College, Changwon 642-741*

Abstract In this study, we quantitatively measure the ion ranges of arsenic with energies ranging from 10 KeV to 100 KeV, implanted at 3°, 9° 15° the (100) plane, and the damage created during ion implantation. To obtain detailed information of ion range and damage distributions in low energy region where elastic collisions dominate the slowing down process, molecular dynamics computer simulation was performed and compared to the existing results. The effects of implant energy and degree on damage generation are present. The number of vacancy were calculated from the deposited energy using Kinchin-Pease equation. In the energy range 10 keV-100 keV, simulations show that the number of Frenckel pairs produced by As-ion bimbardment is 9 and incident angle dependence of the vacancy was the same but defects were distributed at different depth.

(Received May 25, 2000)

Key words: *Computer Simulaton, Defect Formation, Crystal-Silicon, Low Energy Arsenic Implantation, Molecular Dynamics*

1. 서 론

최근, 이온주입기술은 정밀한 불순물 분포의 조절 및 얕은 접합을 할 수 있고, 반도체 소자의 제조공정 시 마스크의 수를 감소시켜 제조 공정을 단순화시킬 수 있기 때문에 많은 연구가 행해지고 있다.

그러므로 이온주입시 발생하는 기판의 손상 및 기판표면으로부터의 입사 입자의 분포는 최종적으로 만들어진 기판의 물리적 특성을 좌우하기 때문에 기판 내 결함의 분포 및 입사 이온의 분포 특성을 분석하는 것은 실용상 매우 중요한 과제가 되고 있다.

현재, 컴퓨터 환경의 발달로 이온주입시 생기는 기판 내 Frenkel 결함 및 입사 입자의 분포에 대한 연구가 몬테칼로(Monte Carlo: 이하 MC) 및 분자동력학(Molecular Dynamics: 이하 MD)과 같은 전산모사실험 방법으로 많이 행해지고 있다[1-4].

Ziegler 등에 의한 MC방법은 지금까지 고 에너지 영역(약 100 keV 이상)에서는 성공적으로 잘 적용되었지만, 이 방법은 기본적으로 2체 충돌(binary collision)을 고려하기 때문에 다체 충돌(mutiple collision)이 일어나는 저에너지 영역(약 100 keV 이하)에서는 적용할 수 없는 단점을 가지고 있다. 따라서 저 에너지 영역에서는 시간변화에 따른 원자들의 충돌에 대한 운동방정식의 해를 직접 구하는 MD방법을 많이 사용한다.

최근 전자소자의 고집적화와 더불어 접합기술의 고도화로 깊은 접합보다는 얕은 접합이 필수적인 기술로 인식되고 있다. 저 에너지로 얕은 접합을 형성시키기 위해서는 약 1000Å이하의 접합 깊이가 필요한데 이러한 목적에 잘 부합하는 입사 원자로는 As이 있다. As은 B, P, Ga, 및 In 등의 여러 가지 불순물 원자들과 달리 Si과 1000℃에서 약 $10^{21}cm^{-3}$ 정도의 큰 용해도를 가지며 큰 질량 때문에 얕은 접합 형성에 많은 이점을 가지고 있어 현재 VLSI 전자 소자용으로 폭 넓은 연구가 진행되어지고 있다[5].

그러나 As 이온주입에 따른 Si기판의 손상정도 및 표면부근에서의 As 입사 이온의 분포특성 등에 관한 실험적인 연구 결과는 여러 연구자들에 의해 많이 발표되고 있으나, 이러한 실험결과는 정성적인 정보밖에 얻을 수 없다. 이온주입에 따른 기판내에서의 결함에 대한 정량적인 분석, 기판표면 부근에서의 입사이온의 분포 거동 등은 이들 입사이온이 매우 미량으로 존재하기 때문에 실험적으로는 규명하기가 매우 곤란하다. 또한 이를 정량적으로 분석하고 있는 연구는 아직 부족한 실정이다.

따라서 본 연구는 MD에 의한 컴퓨터 모사 실험 프로그램인 mdrange를 사용하여[2], 결정 Si 기판에 저에너지 As 이온 주입시 여러 가지 입사 에너지 및 주사각도에 따른 표면으로부터 As 이온 및 결함의 위치와 결정 Si 기판내의 점결함을 정량적으로 조사코져 하였다.

2. 이론 및 계산 방법

입사 이온의 단위길이 당 에너지 손실로 정의되는 입사 이온에 대한 기판의 총 정지력 S_T는 (1) 식과 같이 주어진다[5]

$$S_T = \left(\frac{dE}{dx}\right)_n + \left(\frac{dE}{dx}\right)_e = S_n + S_e \quad (1)$$

여기서 S_n과 S_e는 각각 입사 이온과 기판 원자핵과의 탄성 충돌에 의한 정지력 및 기판원자 내 전자와의 비탄성 충돌에 의한 정지력을 나타낸다.

S_n는 고전 동력학에 의해 잘 기술되어지는 반면에 S_e는 일반적으로 매우 복잡하여 해석적으로 구하기 어렵다. 그러나 As 이온의 경우, 에너지가 700 keV 이하 영역에서는 S_n이 현저하고 S_e는 입사 이온의 속도에 비례하는 끌림 항력(drag force)으로 간주할 수 있다.

따라서 입사 이온이 기판 원자와 계속적으로 충돌하는 이온주입 과정에서 기판 원자에 전달되는 에너지가 기판 원자 하나를 결정 격자점으로 부터 변위시키는데 필요한 에너지 보다 크다면 입사 이온과 기판 원자의 충돌에 의해 Frenkel 결함이 생기게 된다. 따라서 입사 이온이 기판 원자와의 충돌에 의해 기판 원자에 에너지를 주면서 감속해 가는 상황을 조사해 가면 기판표면으로부터의 입사 이온의 분포 및 기판 내에 생성되는 결함의 분포를 알 수 있다.

이러한 이온주입 과정을 분자동력학 방법으로 푼다는 것은 (2) 식의 Newton의 운동 방정식을 수치적으로 계산하는 것을 말한다.

$$\vec{F}_i = \sum_{j \neq i} \vec{F}_{ij}(r_{ij}) = \sum_{j \neq i} \nabla V_{ij}(r_{ij}) \quad (2)$$

여기서 $\vec{F}_{ij}$ 및 V_{ij}는 각각 i, j 원자들 사이에 작용하는 힘 및 포텐셜 에너지이고 j 에 대한 합은 i 원자와 상호 작용하는 모든 원자에 대해 취해진다.

Si-Si간 인력 포텐셜은 다음과 같은 Stillinger와 Weber(SW) 포텐셜을 사용하였다[6].

$$V_A(r) = \phi_2 + \phi_3 \quad (3)$$

여기서 ϕ_2와 ϕ_3는 각각 다음과 같이 2체 포텐셜 및 3체 포텐셜을 나타낸다.

$$\phi_2 = \begin{cases} A(Br^{-p} - r^{-q})\exp[(r-a)], & r < a \\ 0, & r \geq a \end{cases} \quad (5)$$

$$\phi_3 = h(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{ijk}) + h(r_{ji}, r_{jk}, \theta_{ijk}) + h(r_{ki}, r_{kj}, \theta_{ijk})$$

$$h(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{ijk}) = \lambda \exp[\gamma(\gamma_{ij} - a)^{-1} + \gamma(\gamma_{ik} - a)^{-1}] (\cos\theta_{ijk} + 1/3)^2 \quad (4)$$

결정 Si의 경우, SW 포텐셜의 매개변수들의 값은 SW가 구한 값을 사용하였다.[6] 그리고 이온-Si 간 척력 포텐셜은 (5) 식의 Ziegler, Biersack 및 Littmark (ZBL) 포텐셜을 사용하였다[1].

$$V_R(\gamma) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Z_1 Z_2}{\gamma}\phi(\gamma) \quad (5)$$

$$\phi(r) = 0.1818e^{-3.2x} + 0.5099e^{-0.9423x} + 0.2802e^{-0.4029x} + 0.02817e^{-0.2016x} \quad (6)$$

여기서 x는 다음과 같이 주어진다.

$$x = \frac{\gamma}{a_u}, \quad a_u = \frac{0.8854 a_0}{Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}}, \ (a_0\text{는 bohr반경}) \quad (7)$$

계산의 초기상태는 0K 에서 2×2×2 단위격자(64개의 원자)로 이루어진 다이아몬드 구조를 가지는 결정 Si으로부터 시작하였다. 따라서 시료의 크기는 0K 의 경우 결정 Si 의 격자 상수를 5.43Å으로 하였을 때 시료의 한 변의 길이는 5.1835Å이다.

이온주입시 입사 이온의 입사각 및 기판의 방향을 나타내기 위해 매개변수 θ및 φ를 사용하였으며 입사 위치는 시료의 표면 바로 위에서 입사하였다. 매개변수 θ와 φ는 각각 입사 방향이 z축 및 x축과 얼마나 기울어 졌는가를 나타내며 본 연구에서는 φ는 0로 두고 θ는 원하는 값으로 조절하였다.

입사면은 <100>면으로 취했고 Newton의 운동 방정식은 t 시간 간격으로 Verlet 알고리즘을 사용하여 풀었다[7]. 경계 조건은 입사 방향에 수직한 축에 대해서는 주기적인 경계 조건을 사용하였으며, 입사 방향에 평행한 축에 대해서는 Nordlund가 제안한 경계 조건을 사용하였다[2]. 즉, 간단히 설명하면 시료를 입사 축 방향으로 원하는 만큼의 조각(slice)을 만든 뒤 입사 이온이 마지막 조각을 통과하기 전에 이온이 통과한 조각들을 마지막 조각 뒤에 옮겨 놓는 경계 조건을 말한다. 이러한 경계 조건을 사용하면 적은 입자수로도 많은 입자수와 같이 계산할 수 있는 이점이 있다.

한 번의 simulation 과정은 시료 내에서 recoil 된 이온의 입사 에너지가 1eV 가 될 때까지 반복되어지고 총 1000회를 simulation 했다.

3. 계산 결과 및 논의

그림 1과 2는 입사 에너지 및 입사각에 따른 기판표면에서의 As 이온의 투영 거리(projected range) R_p및 이에 대한 표준편차를 나타내는 straggling σ에 대한 값을 나타낸다. 이온이 주입되어 정지하기까지의 전체 거리를 range, R이라 할 때 이로부터 입사 방향인 z축으로 투영한 R_p및 σ는 다음 식으로부터 구하였다.

$$R_p = \sum Z_i / N$$

$$\sigma = \left[\left(\sum_i z_i^2 \right) / N \; R_p^2 \right]^{1/2} \quad (10)$$

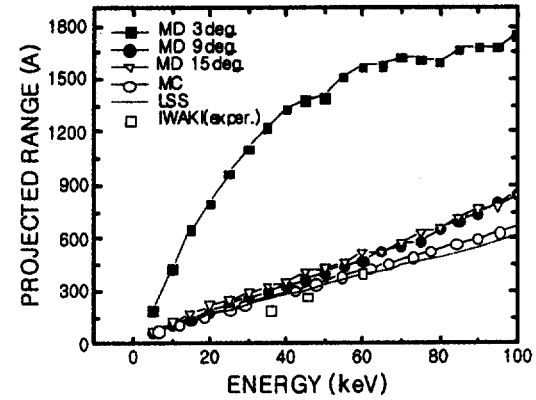

Fig. 1. Projeced range R_p of arsenic with energies ranging from 10 keV to 100 keV, implanted at 3°, 9° and 15° to the (100) plane .

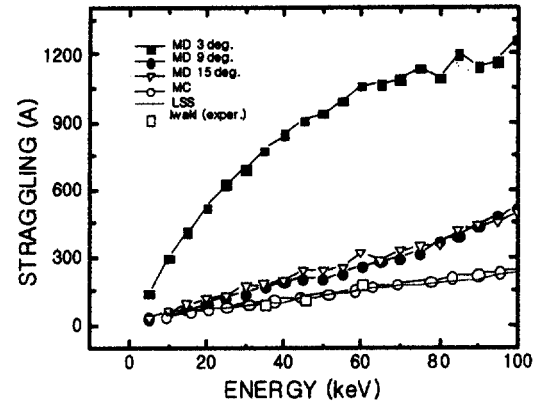

Fig. 2. Straggling σ of arsenic with energies ranging from 10 keV to 100 keV, implanted at 3°, 9° and 15° to the (100) plane .

그림 1의 본 연구에서 계산한 R_p 값은 입사각이 3°일 경우를 제외하고 기존의 MC, 이론 및 실험치 등의 연구 결과와 25%의 오차 범위 내에서 잘 맞았다. 특히 50KeV까지의 저에너지 영역에서는 MC, MD 및 이론치가 잘 일치하고 있는 것을 알 수 있다. 그러나 기존의 연구결과는 입사각에 대한 정보가 없기 때문에 정확한 물리량의 비교는 어렵다고 판단되지만 정성적인 비교는 가능하다고 생각된다. 특히 본 연구에서 계산한 MD의 결과치의 기울기와 실험치의 기울기 잘 일치하고 있으나 MC로 계산한 경우는 약간의 차가 있음을 알 수 있다. 그러나 입사각이 3°일 경우 다른 연구결과치와는 달리 R_p가 매우 큰 값을 갖는데, 이는 입사각이 작아 즉, 입사 입자가 입사면에 수직으로 입사됨에 따

Table 1. Projeced range Rp and Straggling σ for arsenic implantation in crystal-silicon

에너지 (keV)	3		9		15	
	Rp(Å)	σ (Å)	Rp(Å)	σ (Å)	Rp(Å)	σ (Å)
10	434.351	302.284	115.51	63.8411	122.87	60.0268
20	805.412	522.706	182.336	99.2067	219.41	122.095
30	1111.42	695.903	263.69	143.294	293.769	172.837
40	1333.15	846.198	334.96	196.994	354.424	198.197
50	1401.28	941.073	405.198	203.843	431.828	242.988
60	1576.87	1062.06	475.797	259.199	525.875	317.843
70	1628.43	1092.89	566.236	298.441	575.056	327.975
80	1600.31	1097.47	658.429	376.398	656.855	355.86
90	1685.77	1145.02	742.132	439.274	768.822	443.097
100	1748.77	264.37	850.612	512.699	845.248	492.581

라 생기는 channeling 현상이 나타났기 때문인 것으로 판단된다. 그리고 입사각이 증가함에 따라 본 연구에서 계산한 R_p값은 이온의 입사 각도에는 크게 의존하지 않음을 알 수 있는데, 이것은 본 연구에서 사용한 시료의 크기 때문인 것으로 예상된다. 계산한 그림 1의 입사 에너지에 대한 R_p및 σ값을 표 1에 정리하였다.

그림 3에서 그림 5까지는 입사각에 따른 As 이온의 총 입사 에너지 F_d를 나타낸다. F_d는 핵 저지 과정에서 잃게 된 이온 당 입사 에너지의 총량으로서 이러한 총 입사 에너지 F_d만 구하면 공공의 수 N_V는 다음과 같은 Kinchin 과 Peace의 식을 사용하여 구할 수 있다[3].

$$N_V=F_d/2E_d \tag{11}$$

여기서 E_d는 1개의 원자를 격자 위치로부터 변위시키는데 필요한 에너지이다.

그림 3에서 입사 각이 3°일 때의 총 입사 에너지 F_d는 위에서 언급했듯이 channeling 현상으로 인해 시료표면과 내부에서 최대치 없이 거의 일정한 값을 가진다. 입사 각도가 9°인 그림 4에서는 입사 에너지가 커짐에 따라 총 입사 에너지 F_d의 최대치의 위치는 Si의 내부 쪽으로 이동함을 알 수 가 있다. 그러나 총 입사 에너지 F_d의 최대치는 입사 에너지에 관계없이 일정함을 알 수 가 있다. 입사 각도가 15°인 경우는 9°와 거의 같으나 그 폭이 9°보다 더 넓어진다. 이러한 사실로부터 총 입사 에너지 F_d의 최대치는 입사 에너지에 관계없이 입사각에만 의존함을 알 수 있다. 입사각이 9°일 때 입사 에너지가 50 keV 와 100 keV 인 경우, 총 입사 에너지 F_d의 최대치는 각각 132.71 eV/ion 및 131.36 eV/ion이였다. Si의 경우, E_d=15 eV로 했을 때 이 값을 (11)식에 대입하면 약 8.8 개 및 8.7

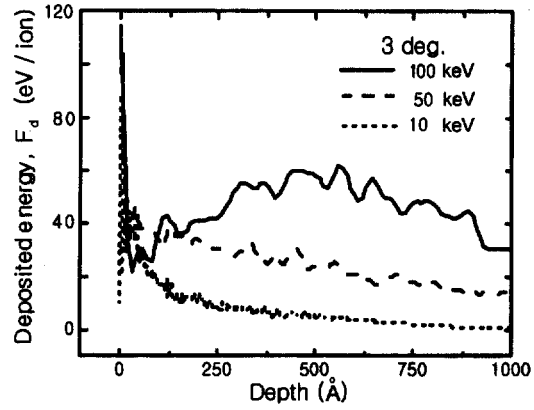

Fig. 3. Deposited energy F_d for arsenic with energies 10 KeV, 50 KeV and 100 KeV, implanted at 3° to the (100) plane.

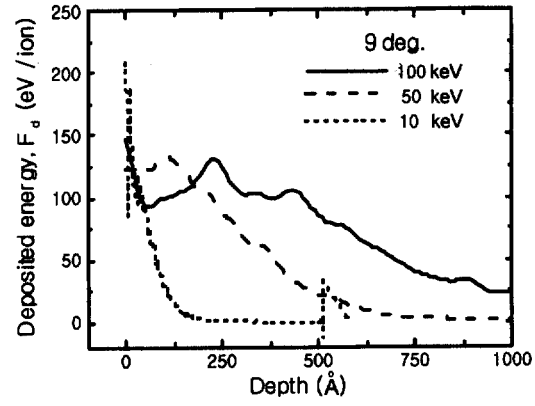

Fig. 4. Deposited energy F_d for arsenic with energies 10 keV, 50 keV and 100 keV, implanted at 9° to the (100) plane.

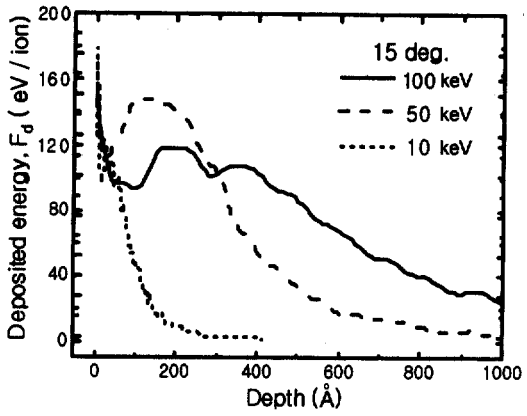

Fig. 5. Deposited energy F_d for arsenic with energies 10 keV, 50 keV and 100 keV, implanted at 15° to the (100) plane.

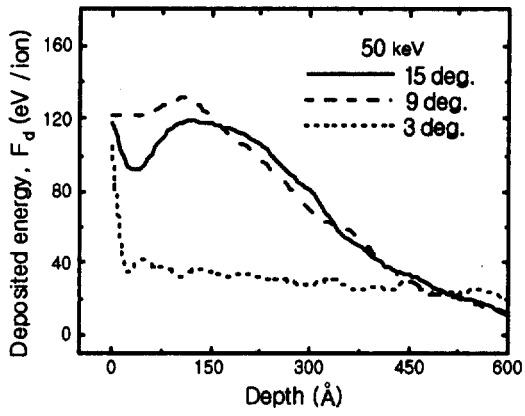

Fig. 7. Deposited energy F_d for arsenic with 50 keV, implanted at 3°, 9° and 15° to the (100) plane.

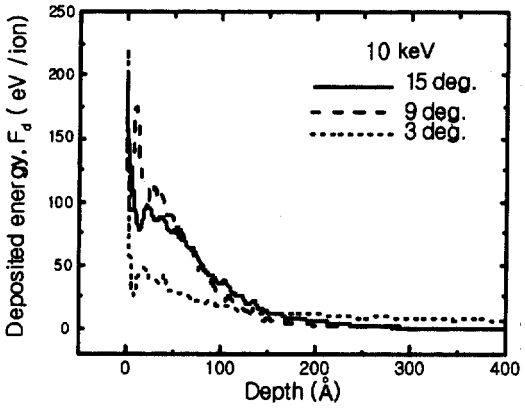

Fig. 6. Deposited energy F_d for arsenic with 10 keV, implanted at 3°, 9° and 15° to the (100) plane.

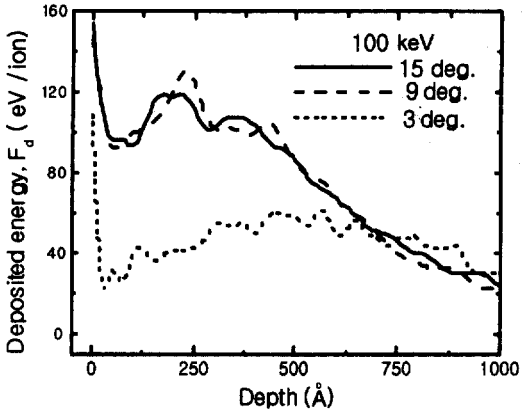

Fig. 8. Deposited energy F_d for arsenic with 100 keV, implanted at 3°, 9° and 15° to the (100) plane.

개의 공공이 생성되었음을 의미한다.

그림 6에서 그림 8까지는 입사 에너지에 따른 총 입사 에너지 F_d를 나타낸다.

그림 6의 10 keV의 에너지에 대해서 입사각도 9°가 15°보다 더 큰 피크치를 가지는 이유는 위에서도 언급했듯이 주기적인 경계조건으로 인해서 시료의 크기가 입사각에 제한을 주기 때문이다. 입사 에너지가 50 keV 및 100 keV 인 그림 7과 8에서 이러한 사실을 확인 할 수 있다. 즉, 입사각이 커지면서 총 입사 에너지 F_d는 channeling 현상이 일어나는 3°인 경우와 같은 양상으로 되어 짐을 알 수 가 있다. 그리고 총 입사 에너지 F_d의 최대값의 위치는 이온의 입사각에 관계없이 입사 에너지에만 의존하고 입사 에너지가 50 keV와 100 keV 인 경우 각각 102Å 및 230Å이였다. 이는 표 1로부터 계산해 보면 결함분포가 기판 표면으로부터 (1/4) Rp 전후의 깊이에 있음을 나타낸다.

4. 결 론

본 연구에서는 결정 Si 기판에 저 에너지 As 이온주입 시 여러 가지 입사 에너지 및 입사각에 따른 As 이온의 range 분포 및 결정 Si 기판의 결함 분포를 조사하기 위해서 분자 동력학으로 컴퓨터 모사 실험한 결과 다음과 같은 사실을 알 수 있었다.

(1) 10 keV에서 100 keV까지의 에너지를 가지는 As 이온의 range 분포 값인 투영 거리 R_p및 straggling σ에 대한 값은 본문 표 1과 같이 구할 수 있었다.

(2) 총 입사 에너지 F_d의 최대값은 As 이온의 입사

각이 9°일 경우 입사 에너지에 관계없이 132 eV/ion 이었고, 약 9개의 공공이 형성되어 있었다.

(3) 총 입사 에너지 F_d의 피크 위치는 As의 입사 에너지가 50 keV 와 100 keV 인 경우 각각 102Å 및 230Å 이였고, 이로부터 결함은 기판 표면으로부터 (1/4) Rp 정도의 깊이에 존재하고 있었다.

참고문헌

1. J. F. Ziegler, J. P. Biersack and U. Littmark, The Stopping and Range of Ions in solids(Pergamon, New York, 1985).
2. K. Nordlund, Comp. Mat. Sci. 3 (1995) 448.
3. K. Nordlund, J. Keinonen and A.Kuronen, Physica Scripta T54, (1994) 34-37.
4. J. Tarus, K. Nordlund, A.Kuronen and J. Keinonen, Phys. Rev. B (1998).
5. S. M. Sze, VLSI Technology, McGraw-Hill Book Company (1988).
6. F. H. Stillinger and T. A. Weber, Phys. Rev., B 31 (1985) 5262 .
7. L. Verlet, Phys. Rev. 159 (1967) 98.