

論文2001-38SD-11-2

ULSI급 CMOS 소자 특성 분석을 위한 몬테 카를로 이온 주입 공정 시뮬레이션시의 효율적인 가상 이온 발생법

(Computationally Efficient Ion-Splitting Method for Monte Carlo Ion Implantation Simulation for the Analysis of ULSI CMOS Characteristics)

孫明植*, 李鎮九*

(Myung-Sik Son and Jin-Koo Rhee)

요 약

ULSI급 CMOS 소자를 개발, 제작하고 또한 그것의 전기적 특성을 정확히 분석하기 위해서는 공정 및 소자 시뮬레이터의 사용이 필수적이다. 대면적 몬테 카를로 시뮬레이션 결과가 다차원 소자 시뮬레이터의 입력으로 사용되려면 과도한 입자수의 증가로 비효율성을 띄게 된다. 본 논문에서는 이러한 문제를 해결하기 위해 3차원 몬테 카를로 이온 주입 시뮬레이터인 TRICSI 코드를 이용하여 물리적으로 타당하며 또한 효율적으로 시뮬레이션 입자 수를 증가시켜 대면적 이온 주입시의 3차원 통계 분포의 잡음 영역을 최소화 하는 방법을 제안하였다. 후속 공정인 열확산 공정이나 RTA(급속 열처리) 공정의 확산 방정식을 푸는 경우 발산을 막기 위해 몬테 카를로 시뮬레이션 결과의 통계 분포에 대한 후처리 과정으로 3차원 셀을 이용한 보간 알고리즘을 적용하였다. 시뮬레이션 수행 결과 가상 궤적 발생법(split-trajectory method)만을 사용한 것에 비해 계산 시간은 2배로 늘이지 않는 범위에서 10배 이상의 이온 입자 생성 분포를 얻을 수 있었다.

Abstract

It is indispensable to use the process and device simulation tool in order to analyze accurately the electrical characteristics of ULSI CMOS devices, in addition to developing and manufacturing those devices. The 3D Monte Carlo (MC) simulation result is not efficient for large-area application because of the lack of simulation particles. In this paper is reported a new efficient simulation strategy for 3D MC ion implantation into large-area application using the 3D MC code of TRICSI(TRANSPORT Ions into Crystal Silicon). The strategy is related to our newly proposed split-trajectory method and ion-splitting method(ion-shadowing approach) for 3D large-area application in order to increase the simulation ions, not to sacrifice the simulation accuracy for defects and implanted ions. In addition to our proposed methods, we have developed the cell based 3D interpolation algorithm to feed the 3D MC simulation result into the device simulator and not to diverge the solution of continuous diffusion equations for diffusion and RTA(rapid thermal

* 正會員, 東國大學校 밀리미터파 新技術 研究센터
(Millimeter-wave Innovation Technology Research
Center, Dongguk Universtiy)

※ 본 연구는 동국대학교 밀리미터파 신기술 연구센터
를 통한 한국과학 재단의 우수 연구센터 지원금에
의하여 수행되었습니다.

接受日字:2001年7月25日, 수정완료일:2001年9月27日

annealing) after ion implantation. We found that our proposed simulation strategy is very computationally efficient. The increased number of simulation ions is about more than 10 times and the increase of simulation time is not twice compared to the split-trajectory method only.

I. 서 론

ULSI(ultra large scale integration)급 CMOS 소자를 개발, 제작하고 또한 그것의 전기적 특성을 정확히 분석하기 위해서는 상용 TCAD 공정 및 소자 시뮬레이터를 사용하여 소자 특성을 분석하고 예측하게 된다. ULSI급 소자는 단채널 효과와 같은 2차원 요소 이외에 3차원적 소자 형성 구조 특성을 고려하여야만 한다. n형과 p형 반도체를 형성하기 위한 이온 주입 분포는 ULSI급 소자의 제작을 위한 가장 중요한 공정들 중의 하나이다. 확산에 비해 측면 분포가 적고, 초미세선의 얇은 접합 및 급경사 접합(abrupt junction)을 이룰 수 있다는 장점으로 인해 소스 및 드레인 뿐만 아니라 well 형성 공정에도 사용되는 이온 주입 공정에 대한 분석 및 이해는 소자 개발의 필수적인 사항중 하나이다.^[1] 또한, 이온 주입후의 급속 열처리 공정(RTA)에서는 이온 주입 공정에서의 결함(defect) 분포가 중요한 입력 변수로서 주어져야 한다. 그래야만 완성 CMOS 소자에서의 정확한 전류와 전압 특성을 이해하고 해석할 수 있게 된다. 3차원 몬테 카를로 이온 주입 시뮬레이션 결과가 이러한 소자 시뮬레이터의 불순물 분포 및 결함 분포로 제공되기 위해서는 많은 시뮬레이션 입자를 필요로 하고, 시뮬레이션 조건이 고에너지 이온 주입 공정이고 주입되는 면적이 대면적인 경우(예를 들면 CMOS 소자의 retrograde-well 형성 공정 및 누설 전류를 억제하기 위한 매몰층(buried layer) 형성 공정)에는 그 수행시간의 과도함으로 인해 그 뛰어난 예측력 및 신뢰성에 비해 적용되기에는 비현실적이다. 이온 주입 후 열확산 공정이 이어지면 이들의 분포를 이용해 연속 확산 방정식을 풀어야 하는 데 통계 분포가 불연속적인 잡음 영역이 많이 존재하는 경우에는 발산을 야기해서 아예 소자 시뮬레이션 자체가 어렵다. 이러한 문제를 해결하기 위해서는 효율적으로 시뮬레이션되는 이온 입자 수를 증가시켜 주어야 한다.

기존의 3차원 시뮬레이션에 제안된 방법들을 살펴보면 낮은 도즈에서 결함의 누적 영향이 이온 주입된 불순물 분포에 영향이 거의 없을 때 사용 가능한 포인트

-응답(point response) 및 비정질층에 대한 궤적 재사용법^[2], 그리고 보다 낮은 에너지 이온 주입 공정에 대해 적용 가능한 가상 이온 발생법^[3]들이 1차원의 작은 입사 면적에 대해 적용되었다. 이것에 더해 병렬 처리 방법들^[4-5]을 개발하여 3차원 대면적/다층 이온 주입 구조에 적용하고 있으나 병렬 연산의 경우는 비교 대상이 아니므로 본 논문에서는 비교 논의하지 않았다. 포인트 응답 및 궤적 재사용법은 이온 주입되는 도즈(dose)량이 큰 경우에는 결함 누적에 의한 이온의 디채널링(dechanneling) 영향을 무시하였으므로 그 결과에 있어 정확성이 떨어지며, 문헌 [3]번의 경우에는 얇은 접합 형성을 위한 이온 주입 공정 조건에 대해 적용 가능하며, 고에너지 및 3차원 대면적 적용이 어려움으로 해서 그 효율성이 감소하게 된다.

본 논문에서는 이러한 문제점들을 극복하고 3차원 몬테 카를로 시뮬레이션에서 결함 및 이온 분포에 대한 정확성을 유지하면서 효율성을 증가시키기 위해 3차원 몬테 카를로 이온 주입 시뮬레이터인 TRICSI^[6]를 사용하여 계산 시간을 증가시키지 않으면서 시뮬레이션 입자를 증가시키기 위한 방법을 제안하였으며, 제안된 방법의 효율성을 비교하여 나타내었다. 또한 소자의 전기적 특성 시뮬레이션에 적용할 수 있도록 계산된 이온 주입 및 결함 결과 분포에 대해 3차원 단위셀을 이용한 보간 알고리즘을 개발 적용하였다.

II. 이온 불순물 분포에 대한 3차원 잡음 영역 최소화 방법

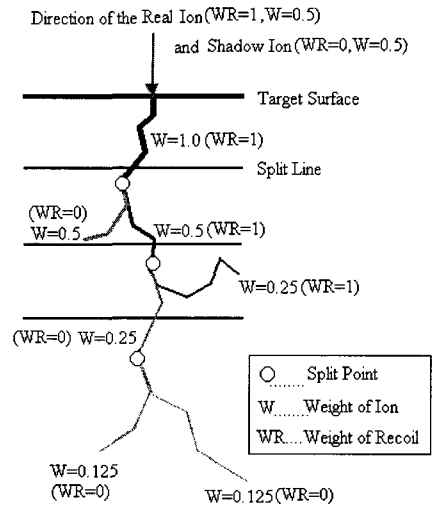
3차원 불순물 및 결함 분포의 잡음영역을 최소화하기 위한 몬테 카를로 이온주입 접근법의 가장 큰 문제는 시뮬레이션 입자 수 증가에 따른 시뮬레이션 시간의 과도함에 있다. 이것이 또한 결함 분포를 계산하기 위해 주입된 이온과의 충돌에 의해 반동된 실리콘 궤적을 모두 계산하는 경우에는 그 시간이 기하급수적으로 증가하게 된다. 일반적으로 에너지에 따라 다르긴 하지만 발생한 결함 분포에 비해 이온 주입된 불순물 분포는 상대적으로 매우 적다. 저에너지 영역(10 keV 이하)이 아니라면 이온 주입 분포에 비해 결함 분포는

수십 배에서 수백 배에 이를 수 있고, 상대적으로 이러한 적은 이온의 잡음 분포는 그대로 소자 시뮬레이션의 입력 분포로는 부적합하게 된다. 본 논문에서는 TRICSI 코드를 이용하여 시뮬레이션되는 이온 입자 수를 효율적으로 증가시키는 가상 궤적 발생법 및 도즈 분리법^[7]에 대하여 3차원 도즈 의존성 및 결합 분포에 대한 고에너지/대면적 이온 주입 공정 시뮬레이션에 적합한 방법을 제안하였다.

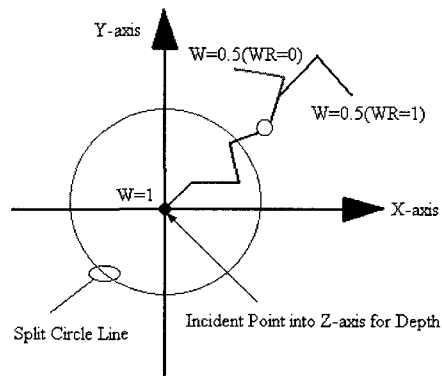
1. 효율적인 가상 궤적 발생법에 따른 새도우 이온 발생법

결합 분포를 정확히 계산하기 위하여 이온 궤적 계산 시 충돌에 의해 발생한 결합 분포를 모두 계산하게 되는데 이때, 충돌에 의한 반동 실리콘 궤적을 모두 계산하는 리얼(real) 이온과 반동 실리콘 궤적을 계산하지 않고 다만 시뮬레이션 이온 수를 증가시키기 위해 이온 궤적만을 계산하는 새도우(shadow) 이온으로 나눈다. 그림 1의 개념도에서 이온 가중치를 W로 표기하였고, 반동 이온 가중치를 WR로 표기하였다. 초기 입사 위치에서의 이온 가중치 W란 전체 이온(보통 새도우 이온 발생법을 적용하지 않는 경우의 한 개의 시뮬레이션 입자)의 가중치를 1로 하고, 이것에 대해 p개의 리얼 이온과 q개의 새도우 이온으로 분리되었다고 가정하면, 리얼 이온과 새도우 이온 구분 없이 갖게 되는 이온 가중치 $W=1/(p+q)$ 이 된다. 즉, 한 개의 이온이 (p+q)개의 정지 이온이 된다는 의미이다. 반면, 초기 입사 위치에서의 반동 이온 가중치 WR은 리얼이온에 대해서만 적용되는 가중치로서, 새도우 이온에 대해서 모두 WR=0의 가중치를 갖게 된다. WR=0의 의미는 반동된 실리콘 궤적을 추적하지 않는다는 의미이다. 만약, 위 경우에서처럼 전체 이온 가중치를 1로 가정하고 p개의 리얼 이온과 q개의 새도우 이온을 발생한 경우라면 q개의 새도우 이온은 모두 WR=0이며, p개의 리얼 이온 반동 가중치는 각각 $WR=1/p$ 이 된다. 따라서, p개의 리얼 이온에서 발생한 결합들을 모두 모으면 전체 이온인 1이 된다. 보통 1개의 이온이 수십 배에서 수백 배의 충돌에 의해 반동된 실리콘 원자들을 발생시키며, 이온 주입 에너지가 높을 수록 주입된 이온이 무거울수록 반동 원자 수는 증가한다. 시뮬레이션 효율을 위해서는 가능한 한 $p \ll q$ 인 관계를 유지하여야 하는데, 통상 $p=1, q=10$ 이상의 값을 갖도록 하는 것이 효율적이다.

그림 1의 개념도에서 초기 입사 위치에서 한 개의



(a) 깊이 방향의 이온 분리



(b) 측면 방향의 이온 분리

그림 1. 3차원 궤적 분리법(split-trajectory method)에서의 리얼(Real) 이온과 새도우(Shadow) 이온의 정의

Fig. 1. Definitions of Real ion and shadow ion in the 3D split-trajectory method (a) ion splitting at the depth positions (b) ion splitting at the lateral positions.

리얼 이온에 대해 한 개의 새도우 이온을 발생시켰다는 가정 하에 WR=0은 반동 궤적을 추적하지 않음을 의미하며, WR=1은 결합 궤적을 계산함을 의미한다. 그림에서는 설명을 간단히 하기 위해 분리 가짓수(number of split branches)가 2인 경우이고, 새도우 이온은 1개의 리얼 이온에 대해 한 개씩 발생할 경우에 대해 묘사되었다. 초기 입사 위치에서의 리얼 이온은 반동 이온 가중치 WR=1이고, 이온 가중치 W=0.5이므로 반동 궤적을 모두 구해 결합 분포를 만들고 주입된

이온 분포에는 반만큼의 기여도를 나타낸다. 반면 초기 위치의 새도우 이온은 반동 궤적을 구하지 않으면서 (WR=0) 이온 분포에는 반만큼의 기여도(W=0.5)를 갖음을 의미한다. 시뮬레이션시 한 개의 시뮬레이션 이온이 충돌 후의 위치가 가변적으로 변하도록 설정된 깊이 및 측면 분리선(split lines)을 넘는 조건을 만족한다면 이 충돌에서 분리되어 궤적을 추적해야할 이온 수는 분리가짓수 만큼 늘어나고, 그것의 이온 가중치나 반동 가중치는 [분리전가중치×(1/분리가짓수)]로 줄어들게된다. 예를 들어, 1개의 리얼 이온에 대해 분리가짓수가 2이고, 첫 분리선(first split line)을 넘어서 충돌이 일어난 경우, 리얼 이온은 2로 늘어나고 가중치는 1/2로 줄어들음을 의미한다. 이것은 새도우 이온에도 그대로 적용된다. 이러한 상황은 적어도 분리선 이전의 궤적을 두 개의 이온이 공유하게 되므로 분리 없이 두 개의 이온을 시뮬레이션하는 경우에 비해 계산 시간을 단축시킬 수가 있게 된다.

3차원 시뮬레이션 구조에 따른 분리선의 의존도를 줄이기 위해 분리선은 고정된 것이 아니라 이온이 산란되어 들어가는 깊이 방향과 측면 방향으로의 평균 깊이 값 및 평균 측면 값(그림 1(b)의 측면 산란 그림에서 원의 반지름을 의미하며 분리선은 원의 원주가 됨)을 계산하여 첫 번째 분리선으로 정의하고 이것으로부터 일정한 간격으로 분리선을 등간격으로 설정하였다. 따라서, 도즈 변화에 따라 이온 분포가 변하면 자동적으로 분리선들이 변화하게 되어 효율적으로 이온들을 분리시킬 수 있도록 하였다. 분리되는 우선 순위는 깊이 방향 분리선이 우선하며 이후 측면 방향 분리선을 확인하여 분리시킬 것인가를 결정하였다. 시뮬레이션에서 깊이 방향 분리선 수는 디폴트값은 5이며, 측면 분리선은 깊이 분리선의 반을 사용하는데, 2.5인 경우 반올림 처리하여 3으로 설정되도록 하였다. 높은 도즈로 이온 주입되는 경우에는 채널링 꼬리 부분에 도달하는 시뮬레이션 이온 수가 매우 적으므로 효과적으로 채널링 부분을 시뮬레이션하기 어렵다. 아래 소절에서 기술하는 도즈 분리법과 함께 그림 2에서의 영역 n 가중치의 증가에 따라 보다 많은 이온들을 분리시킴으로써 채널링 꼬리 부의 잡음 분포를 최소화시킬 수 있다. 채널링 꼬리 쪽으로 갈수록(n 영역 가중치 값이 증가하는 방향) 채널링되는 이온 양이 매우 적게 되므로 도즈 분리법과 함께 기본 분리 가짓수(N_{split})를 일정하게 적용하지 않고 영역 n에서의 영역 가중치를 고려한 분

리되는 이온의 수(f_n)는 식 (1)과 같이 결정함으로써 깊은 채널 꼬리 영역에서 보다 많이 효율적으로 분리되도록 하였다. 시뮬레이션 디폴트 값은 기본 분리 가짓수는 3으로 설정하였다. 깊이 방향뿐만 아니라 측면 방향에 대해서도 아래의 식 (1)이 적용되었다. 본 논문에서 개발 적용한 방법은 깊이 방향 분리가 측면 방향 분리에 우선하도록 설정하였다. 깊이 방향 분리를 먼저 확인하고, 깊이 방향 분리가 없다면 측면 분리를 고려하도록 설정되었다.

$$f_n = \max(n - 1, 1) \cdot \max(N_{split} - 1, 1) + 1 \quad (1)$$

여기서, n은 그림 2에서 보인 농도 분포 영역에 따른 가중치 값이며, 그림에서와 같은 1 이상의 영역 가중치를 갖는 값으로 설정하였다. max(a,b)함수는 a와 b중 큰 값을 선택하는 함수이다.

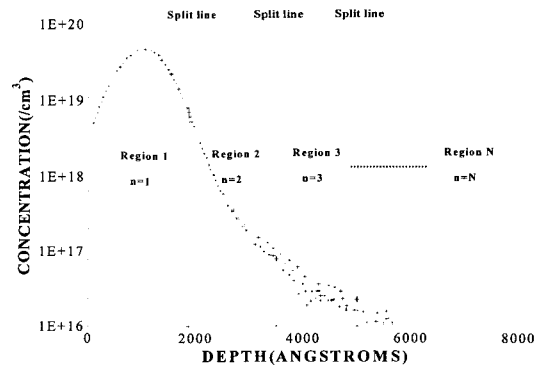


그림 2. 효율적인 이온 분리를 위한 분리선에 의한 농도 영역별 분리가짓수의 가중치 n의 설정
Fig. 2. Determination of weighting factor, n, for concentration regions separated by split lines in order to split ions efficiently.

가상 궤적 발생법(split-trajectory method)에서 분리선(split line)을 기준으로 가상 궤적을 발생시킬 때, 새도우 이온을 위한 가상 궤적과 리얼 이온을 위한 가상 궤적을 만든다. 리얼 이온에 대한 궤적은 계속 분리되며 동시에 반동 궤적 또한 계산한다. 그러나, 새도우 이온 궤적은 리얼 이온이 분리되는 지점의 산란 조건을 반복해서 재사용할 뿐 새도우이온 궤적에 의해 만들어지는 반동 궤적은 계산하지 않는다. 실리콘의 열적 진동 효과에 의한 궤적 변경으로 인해 미세한 차이의 3차원 분포를 야기하게 되고, 리얼 이온과 일정 깊이의 궤적을 함께 사용하게 되므로 일정 깊이 이후의 보다

많은 이온 분포를 나타낼 수 있다. 리얼 및 새도우 이온들은 다시 분리 궤적을 만들게 되지만 리얼 이온에 비해 반동 궤적을 계산하지 않는 새도우 이온은 최종 정지 이온의 수를 증가시키면서 수행시간은 리얼 이온에 비해 훨씬 줄어들게 된다. 첫 분리선을 평균 깊이 값으로 설정되어 있으므로 첫 분리선 내에서의 분포는 전적으로 시뮬레이션되는 이온 입자 수에 달려 있다. 가상 궤적 발생은 주로 불순물 농도가 적은 주변 잡음 영역을 최소화하기 위한 방법이므로 비교적 불순물 농도가 높은 영역 즉, 첫 번째 분리선 내부 영역은 전적으로 시뮬레이션되는 이온 입자 수에 의존하게 된다. 3차원 수행을 위해선 적어도 1,000개 이상의 초기 시뮬레이션 입자 수를 사용하게 되지만 고에너지 이온 주입과 같은 경우에는 깊이 방향에 따른 최고 농도가 표면에서 먼 실리콘 벌크(bulk) 쪽으로 치우쳐 발생하게 되므로 이때에는 초기 시뮬레이션 입자를 증가시키지 않으면 1차원 깊이 분포 자체도 시뮬레이션하기 어려워진다. 초기 시뮬레이션 입자의 증가는 리얼 이온수의 증가를 의미하므로 고에너지와 같은 시뮬레이션에서는 컴퓨터 수행시간이 급격히 증가하게 된다. 제안된 1번 방법에서의 단점으로 지적되는 점을 고려하여 시뮬레이션하기 위한 방법을 아래와 같이 제안하였다.

2. 도즈 분리법에 따른 새도우 이온 발생법

기존의 UT-MARLOWE에서 제안된 방법^[7-8]은 입사 면적이 $54.3\text{\AA} \times 54.3\text{\AA}$ 으로 아주 작은 영역에 주입된 이온 궤적 및 반동 궤적이 입사 단위 면적에 대한 깊이 방향으로의 단위 정육면체의 체적 영역을 빠져나가는 경우에는 이온이나 결함 궤적이 나간만큼 들어온다는 가정 하에 거울 반사시켜 이 영역 내에서 계산하여 저장된 결함 분포를 가지고 도즈 의존성을 시뮬레이션하였다. 이러한 1차원의 엄격히 제한된 시뮬레이션 구조에서는 입사 단위 면적의 어떠한 위치에 새도우 이온의 초기 입사 위치를 발생시키더라도 문제가 없으나 3차원 입의구조에 대해서는 문제가 발생한다. 즉, 리얼 이온이 입사된 위치로부터 어느 정도의 반경 내에 위치시켜야 리얼 이온의 궤적과 닮은 분포를 나타낼 수 있는가 하는 점이다. 가장 단순하고 확실한 방법은 비정질 시뮬레이션에서의 포인트-응답(point-response)법과 같이 초기 입사 위치를 동일하게 사용하여 새도우 이온의 초기 입사 위치를 결정하면 적어도 리얼 이온이 겪게 되는 결함 분포와 비슷한 환경을 겪게 될 것이라는 점이다. 리얼 이온과 너무 멀리 새도우 이온을

발생시키면 맞이하게 되는 결함 분포가 다름으로 해서 리얼 이온의 궤적을 흉내낼 수 없게 된다.

제안 적용된 방법은 포인트-응답 분포를 여러 번 반복 복사하여 사용하는 방법과는 다른데, 이러한 방법은 한 점 내지는 아주 작은 영역에서 많은 이온 분포(포인트 응답 분포)를 계산한 후, 이들의 분포를 일정 간격으로 복사하여 대면적 시뮬레이션에 적용하는 것이다. 이때의 가정은 도즈의 영향이 없는 낮은 도즈거나 비정질 물질에 대해선 타당하나 단결정 구조에서 도즈에 따라 근접 지역의 결함 누적 정도에 영향을 받는 경우에는 타당하지 않다. 그러나, 제안된 방법은 도즈가 변함에 따라 이들의 결함 분포 누적 변화에 따라 포인트-응답 분포를 나타내게 되므로 포인트-응답법과는 다른 방법이다. 새도우 이온의 물리적 근거는 리얼 이온이 경험하는 결함 분포와 동일하다는 가정 하에 사용 가능하다. 1차원인 방법의 경우에는 동일한 결함 상태에서 새도우 이온 분포는 리얼 이온의 분포와 같아야 한다. 3차원 시뮬레이션에서 이러한 조건이 충족되기 위해서는 가능한 한 리얼 이온이 맞이하는 결함 분포에서 벗어나서는 안되므로 리얼 이온의 초기 입사 위치와 동일 위치를 사용하여 가능한 리얼 이온의 결함 지역을 벗어나지 않도록 시뮬레이션할 필요가 있다. 또한, 리얼 이온이 많은 이온들을 대표하는 가중치를 갖고 시뮬레이션하게 되므로 이들의 대표성 중 하나에 대한 새로운 궤적을 만드는 것이므로 동일 결함 상태에서 리얼 이온과 새도우 이온의 분포는 차이를 나타내지 않는다. 결함 분포는 리얼 이온이 반동 궤적과 함께 시뮬레이션하고, 새도우 이온은 반동 실리콘 궤적을 추적하지 않고 리얼 이온과 동일한 결함 분포에서의 이온 궤적만을 계산하게 된다.

또한 새도우 이온 생성법은 높은 도즈에 대해 시뮬레이션하는 경우에 가상 궤적 발생법이 주로 낮은 농도에 대해 많은 이온 입자 수를 생성시켜 주는 것에 비해 높은 농도에 대해선 전적으로 리얼 이온의 수에 의존하게 되므로 고에너지 이온 주입이나 높은 도즈의 이온 주입에서는 고농도 지역에서 시뮬레이션 입자 수가 적어 3차원 잡음 영역들이 나타나게 되는데 이것을 보완할 수 있는 효율적인 방법이 필요하다.

본 논문에서는 이러한 점을 해결하기 위하여 도즈 분리법^[7-8]에서 고농도 영역 시뮬레이션 시와 낮은 농도 시뮬레이션하는 경우에 다른 비율로 새도우 이온을 생성시켰다. 초기의 낮은 도즈에서는 누적 발생한 결함

분포가 적으므로 대면적 시뮬레이션에서는 누적된 결합 분포에 따라서 이온 주입된 농도 분포의 꼬리 영역에서 리얼 이온 분포와 차이가 발생하게 되므로 적은 새도우 이온을 발생시키고 많은 가상 궤적 새도우 이온을 발생(2.1의 방법)시켰다. 높은 도즈에서는 반대로 많은 새도우 이온을 발생시키고 가상 궤적에 의한 새도우 이온은 적게 발생시켰다. 이러한 새도우 이온 발생법은 결합의 정확한 시뮬레이션을 위하여 반동궤적을 추적하는 몬테카를로 모델뿐만 아니라 3차원 대면적 고에너지 시뮬레이션에서도 이온 수를 증가시키는 데 매우 효율적인 방법이다.

위에서 언급 제시된 방법들은 도즈에 따른 결합 누적 분포에 대한 독립된 병렬 계산이 가능한데 동일 시뮬레이션 구조에 이온에 대한 초기 입사 위치 및 초기 입사각에 대한 난수 값을 달리하여 시뮬레이션한 후 이들 분포의 동일 셀에 대한 평균값을 취하여 평균 분포를 구할 수 있다. n 개의 동일 컴퓨터를 사용한다면 동일시간에 n 배의 결합 분포와 이온 분포를 얻을 수 있고 이것의 평균 분포로 3차원 이온 분포 및 결합 분포를 결정할 수 있다. 이러한 병렬 처리 분포는 다른 또 하나의 동일한 3차원 통계 분포이므로 셀과 셀 사이의 빈 영역(잡음 영역)을 최소화시킬 수 있다.

3. 소자 시뮬레이터의 입력을 위한 내부 3차원 셀 보간 알고리즘

적은 시뮬레이션 입자 수를 사용하여 계산된 결과는 셀과 셀 사이에 입자가 없어서 나타나는 빈 셀들이 존재하게 된다. 이런 비연속적인 농도 분포가 나중에 후속 열처리 공정에서 열확산 연속방정식을 푸는 경우에 발산을 야기하게 되는 주요한 원인이 된다. 이러한 불연속성을 극복하기 위한 대안으로 이온 주입 시뮬레이션 후 통계적 잡음 영역을 최소화하기 위해 3차원 셀 평균 알고리즘을 3차원 분포에 대한 보간 방법으로 개발 적용하였다. 이러한 보간 방법은 소자 시뮬레이션시 이온 주입 분포의 잡음 영역에 의한 연산 수행시의 발산을 막을 수가 있다.

알고리즘을 설명하기 위하여 그림 3과 같이 셀들을 3차원으로 표현하였다. 3차원 셀 평균 알고리즘은 데이터 값이 없는 셀의 보간(interpolation)을 위하여 주위 값들의 평균을 취하여 그 값을 데이터가 없는 셀에 보간하는 방법이다. 설명을 단순하게 하기 위해 굵게 표시된 2차원 면에서 노란 색으로 표시된 데이터 값이 '0'인 셀의 값을 정하는 방법으로 설명을 한다. 노란색 셀

주위의 각 9개 셀의 평균값을 구해서 보간을 한다고 가정하면 4가된다. 여기서 셀 데이터 값들의 평균값은 '셀의총합/총셀의수'이므로 '0'이 많은 셀의 개수가 많아지면 주위의 값보다 현저히 작아져서 문제가 있으므로 4라는 값을 선택하기가 어려워진다. 이런 문제점은 '0'이라는 값을 갖는 셀의 개수가 평균값 계산 시에 일률적으로 고정된 셀의 개수 9에 포함시키게 되면 발생하게 된다. 이 문제를 해결하기 위해 데이터 값이 있는 셀의 개수만 취해서 총 셀의 개수를 계산하면 이러한 문제를 피할 수가 있다. 데이터 값이 있는 셀들만으로 총 셀의 개수 4를 결정하여 노란색 셀에 삽입될 평균값을 계산해보면 9가된다. 그런 다음 i 축 방향(녹색 화살표 방향)으로 한 셀을 이동시켜서 다음 '0'을 갖는 셀의 평균값을 구해나간다. 이번에는 그림에서 보라색의 9개 셀에 대한 2차원 면에서 '0'을 갖는 셀이 중앙에 위치 시에는 평균값은 8.67이 된다. 그러나, 여기서 또 하나의 문제점을 발견하게 되는데 그것은 노란색 셀의 데이터 값이 다음 셀에 영향을 주어 3차원을 고려하였을 때 '0'값을 채워나가는 순차적인 방향에 따라 결정되

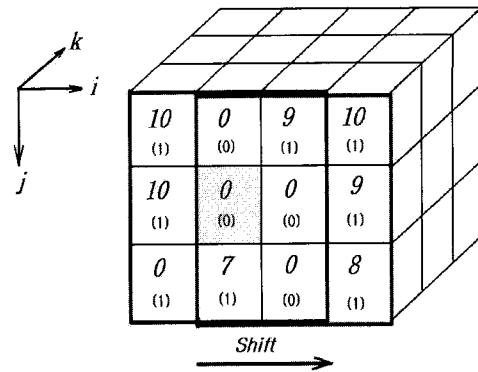


그림 3. 3D 내부셀들의 평균 보간을 설명하기 위한 셀들의 구조
Fig. 3. 3D cells' structure to explain the interpolation of 3D inner cells by their average concentration.

는 값들이 다르다는 점이다. 이런 문제점을 보완하기 위하여 데이터 값에 0과 1이라는 플래그(flag)를 달아서 보간 전에 데이터가 없었던 셀에는 '(0)' 플래그, 데이터가 있는 셀에는 '(1)' 플래그를 달아서 평균값을 구할 때 각 데이터 값에 플래그 값을 곱한 후 이 값들에 대한 총합을 구한다면 평균값으로 보간된 값들이 다음 보간 값을 결정할 때 기여하지 못하게 할 수 있다. 이것은 간

단한 아래 식으로 표현된다:

$$C_i = \frac{\sum_{k=1}^n (C_k \times F_k)}{\sum_{k=1}^n F_k} \quad (2)$$

여기서, C_i 는 보간될 셀의 평균값이고 C_k 는 결정될 C_i 를 둘러싸고 있는 직육면체 셀들의 값이고, 플렉을 나타내는 F_k 는 0과 1만을 갖는 플렉으로서의 2진 값이다. 3차원 보간에서 n 은 27개를 사용하였다. 즉, $3 \times 3 \times 3$ 셀을 고려하였다.

이 방법을 사용하면 이온 주입된 농도는 그대로 유지하면서 채워지는 방향에 상관없이 값없는 셀들에 대한 보간 값들을 결정할 수가 있다. 이러한 2차원 과정을 3차원으로 확장하면 C_i 라는 값 주위를 둘러싼 정육면체 셀들의 체적으로 쉽게 확장하여 이해할 수가 있으며, 이것을 각축에 대하여 순차적으로 탐색하며 값을 채워나간다. 값이 없는 곳에서만 값을 보간하므로 제안된 알고리즘은 어떠한 방향으로 값을 채워나가더라도 시뮬레이션된 분포를 그대로 유지하면서 농도 분포 내부의 빈 셀들을 평균값으로 채워 나가게 된다. 내부 보간 알고리즘을 적용하여 시뮬레이션한 결과 셀들 사이가 보간되어 특히 이온 분포의 체적 내부의 빈 공간(잡음 영역)이 보간되었음을 확인하였다. 보간 알고리즘의 개발로 얻는 이점은 수행 시간 감소뿐만 아니라 데이터의 연속성과 통계적 잡음영역을 최소화 할 수 있다는 것이며, 이러한 후 처리 결과는 몬테 카를로 시뮬레이션 결과를 소자 시뮬레이터의 입력으로 제공할 수 있음을 의미한다.

IV. 3차원 몬테 카를로 시뮬레이션 적용 결과

우선 제안된 방법에 따른 시뮬레이션 계산 결과의 정확성을 검증하기 위하여 사용된 방법에 따른 SIMS 측정 결과^[7]와 비교하여 그림 4에 나타내었다. 결과 비교도에 표시된 영문 약어 표기는 도즈 분리법(Dose-Split Method)은 DSM, 가상 궤적 발생법(Split-Trajectory Method)은 STM, 새도우 이온 발생법(Ion-Shadowing Method)은 ISM으로 나타내었다. STM&ISM은 본 논문에서 제안된 STM방법과 함께 새도우 이온 방법을 동시에 사용한 방법을 의미한다. '+' 기호는 동시에 사용하여 시뮬레이션되었음을 의미

한다. 시뮬레이션 결과에서 분리선은 5개, 기본분리가짓수는 3개로 설정하였으며, 3차원 단위셀의 크기는 $108.6 \text{ \AA} \times 108.6 \text{ \AA} \times 108.6 \text{ \AA}$ 으로 설정하였고, 시뮬레이션 결과 그림에서의 단위는 모두 [Å]이다.

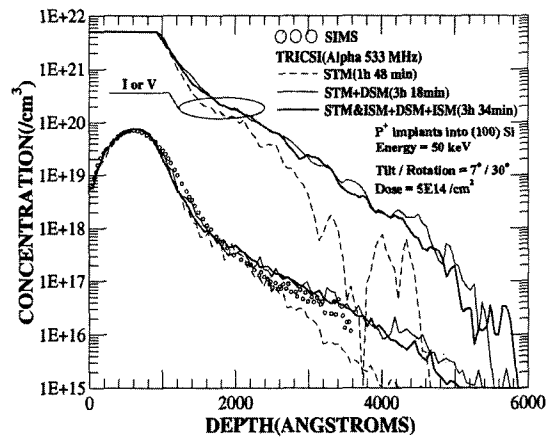


그림 4. STM 및 STM+DSM 그리고 STM&ISM+DSM+ISM의 시뮬레이션 결과 비교
Fig. 4. Comparative simulation results of STM and STM+DSM with STM&ISM+DSM+ISM.

그림 4에서는 STM과 STM+DSM의 시뮬레이션 차이를 1차원으로 나타내어 비교한 그림이다. 이온 주입된 사각형 영역은 $0.4034 \mu\text{m} \times 0.4034 \mu\text{m}$ 이었고, 초기 시뮬레이션 입자수는 STM인 경우에는 1,000개를 사용하였고, DSM인 경우에는 도즈(dose)를 분리하여 초기 $1 \times 10^{14} / \text{cm}^2$ 에 대해서는 20%에 대해 6배인 1,200개를 사용하여 시뮬레이션하고 이후 도즈 $5 \times 10^{14} / \text{cm}^2$ 까지는 800개를 사용하였다. STM만 사용한 결과에서는 채널링 부분에 입사 이온이 적어 결합 분포와 이온 분포 모두 충분히 시뮬레이션되지 못하였음을 나타내고 있음을 알 수 있다. STM+DSM법은 DSM에 STM을 동시에 적용하여 시뮬레이션한 결과이며, 이온 주입 및 결합 분포에 있어서 채널링된 꼬리 부분 및 전체적으로 좀 더 부드러운 농도 분포를 나타내어 시뮬레이션 되었음을 보여 주고 있다. 이것은 비록 1차원 농도 분포로 나타낸 결과이지만 측면 가상 궤적 분리도 고려한 3차원 시뮬레이션 결과이므로 채널링 부분 이외에도 좀 더 많은 측면 가상 궤적 발생으로 인해 농도 분포 전 영역에서 좀 더 부드러워진 곡선 분포를 나타내고 있음을 보여 주고 있다. STM+DSM 방법이 극명하게 이온 및 결합 분포에 있어서 저농도에서 고농도 분

포를 시뮬레이션하여 표현하고 있음을 보여 주고 있다. STM+DSM에 있어서의 결합 분포의 차이는 이온 가상 제적 분리 발생시에도 결합 분포를 모두 추적하게 되므로 더 많은 결합 분포를 얻었기 때문이다. STM에서 발생된 이온 개수는 24,382개였으며, STM+DSM에서는 121,279개 발생되었다. 수행시간은 STM에 비해 1.83배 증가하였으나, 이온 발생은 대략 5배 증가하였다.

또한, STM+DSM을 기준으로 하여 본 논문에서 제안된 STM&ISM+DSM+ISM을 적용한 결과를 비교하여 나타내었다. 비교를 위하여 STM과 DSM의 설정 조건은 STM+DSM에서와 같게 유지하였다. STM&ISM에서는 3개의 기본 분리된 이온에 대해 이온 새도우 발생을 시켜서 기본인 3개의 이온들은 결합을 추적하여 계산하고, $(\text{기본분리가짓수}-1) \times \text{이온새도우배수}$ 에 의해 이온을 새도우 발생시켰으며, 이온 새도우 배수는 2로 설정되었다. 따라서, 분리선을 넘은 이온은 5개로 쪼개지며 이들 중 3개는 리얼 이온이고, 나머지 2개는 새도우 이온이 된다. 이렇게 분리된 리얼 이온 및 새도우 이온은 깊이 방향인 수직 방향 및 측면 방향으로 분리선을 넘게 되면 계속하여 분리되어 가상 제적을 발생시키도록 하였다. STM&ISM+DSM+ISM에서 ISM 방법은 STM&ISM법과는 다르게 초기 이온 주입되는 입사 위치만 같이 사용하여 리얼 이온의 제적을 흉내 내게 된다. 반면 STM&ISM법은 분리선까지의 제적을 공유하게 된다는 점이 다를 뿐이다. ISM에서 한 개의 리얼 이온에 대해 3개의 새도우 이온을 사용하였으므로, 리얼 이온과 리얼 이온의 사이에 3개의 새도우 이온이 시뮬레이션된다. 즉, 1개의 리얼 이온 주입→3개의 새도우 이온 주입→1개의 리얼 이온 주입 순으로 시뮬

표 1. 그림 4의 시뮬레이션 조건에서 사용된 방법에 따른 계산시간과 생성 입자수의 비교

Table 1. Comparative simulation results of the CPU time and the number of generated ions in each used method in the ion implantation simulation condition of Fig. 4.

사용된 방법	CPU Time	이온 생성 입자수	결합 발생수
STM	1시간 48분 28초	24,382개	1,237,671개
STM+DSM	3시간 17분 48초	121,279개	1,180,222개
STM&ISM+DSM+ISM	3시간 34분 12초	270,197개	1,186,385개

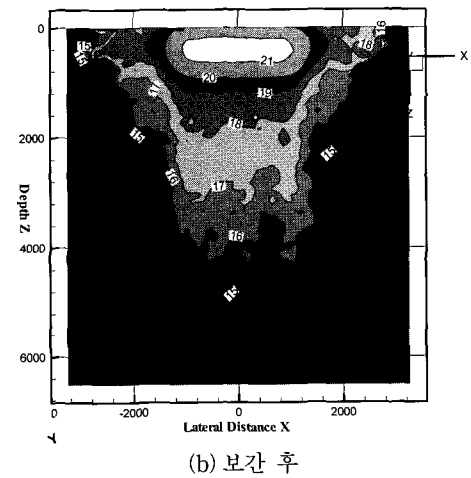
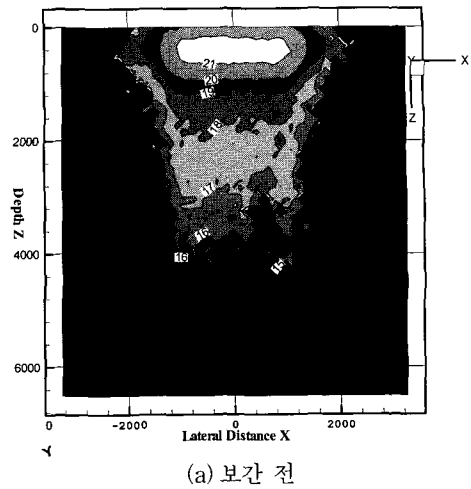


그림 5. 3차원 내부 셀 평균 보간 알고리즘 적용 전후의 이온 분포 비교

Fig. 5. Comparative simulation results of distribution before interpolation of 3D inner cells by their average concentration with distribution after the interpolation.

레이션된다. 리얼 이온 및 새도우 이온 모두 STM법을 모두 적용하였으므로, 기하 급수적으로 생성 이온 수를 증가시키게 된다. STM&ISM+DSM+ISM에서 전체 이온 생성 개수는 STM&ISM+DSM에서의 생성 개수에 대한 새도우 이온 발생 배수의 곱으로 나타나게 된다. 제안된 방법이 더 많은 입자들을 생성시키므로 더 부드러워진 곡선을 나타내고 있으며, 결합 분포에 있어서는 차이를 나타내지 않고 있음을 알 수 있다. 제안된 방법이 시뮬레이션 이온 입자 수는 증가시키지만 결합 분포는 증가시키지 않았음을 보여 주고 있다. STM+DSM을 기준으로 했을 때 제안된 방법들의 상대적 시

물레이션 시간 증가와 생성 입자수 증가에 대한 결과를 표 1에 요약하여 나타내었다. 표에서 보는 바와 같이 제안된 방법이 STM만을 사용했을때와 비교하였을 때 계산 시간을 2배로 증가시키지 않는 범위 내에서 생성 입자 수는 10배가 넘음을 보여 주고 있다. 산술 곱으로 단순하게 생각하면 입자 수 10배는 수행시간 10배를 의미하므로, 제안된 방법이 효율성에 있어 5배 더 효율적임을 나타내고 있으며, STM+DSM에 비해 비슷한 계산 시간에 대해 생성 입자 수는 2배 증가하였음을 확인할 수 있었다.

그림 5에서는 3차원 셀 보간 전후의 결과를 비교하기 위해 본 논문에서 제안된 방법으로 에너지 30 keV, 도즈(dose) $1 \times 10^{16}/\text{cm}^2$, 0° tilt 및 0° rotation 각으로 $2,172\text{\AA} \times 2,172\text{\AA}$ 의 사각형 영역에 Phosphorus 이온 주입시의 3차원 시물레이션 결과 분포에서 이온 주입된 정 사각형 윈도우 영역의 정가운데를 지나는 x방향을 따라 슬라이스 평면(slice plane)(y=0인 평면)을 잘랐을 때 나타난 2차원 등농도선 그림이다. 등농도선에 표시된 값은 농도값에 대해 상용로그(log10)를 취한 값이며, 생성된 입자수는 대략 2백만개 정도였고 결함의 1/3정도 수준으로 생성된 이온 분포 결과도이다. 보간 전의 외부 잡음 영역이 사라지고 내부셀들이 보간되어 나타났음을 확인할 수 있으며, 제안된 방법이 최종 생성 입자 수가 많으므로 부드러운 등농도 곡선을 보여 주고 있다. 이러한 본 논문에서 제안된 시물레이션 결과는 CMOS 소자 특성 분석 시에 공정 시물레이터나 소자 시물레이터에 직접 이온 및 결함 입력 분포로 제공될 수 있음을 보여 주는 결과이다.

V. 결 론

ULSI/GSI급 CMOS 소자 특성 분석을 위해 3차원 몬테 카를로 시물레이션에 있어서 효율적으로 시물레이션 입자 수를 증가시키기 위한 새도우 이온 발생을 제안하였으며, 소자 시물레이션 입력을 위한 보간 알고리즘도 개발하였다. 제안된 방법 모두 정확성을 유지함을 확인하였고, 가상 궤적 발생법만을 사용한 경우에 비해 계산 시간을 2배 이상 증대시키지 않는 범위에서 가상 궤적 발생법만을 사용한 것에 비해 효율적으로 입자 수를 10배 이상 증대시키는 것을 확인하였다. 본 논문에서 제안된 방법은 ULSI/GSI급 CMOS 소자 개발에 있어서 well 형성 공정이나 채널 문턱전압 제어,

이온 주입에 의한 매몰층 형성과 같은 고에너지 이온 주입 공정에 있어서 효과적인 시물레이션을 수행할 뿐만 아니라 저에너지 공정에서는 더욱 빠른 수행 시간을 보장할 수가 있다. 이러한 결과는 앞으로 이온 주입 공정 조건의 변화에 따른 반도체 소자의 전기적 특성을 해석하고 이해하여 ULSI/GSI CMOS 소자를 보다 빠르게 개발하는데 큰 도움을 주리라 기대된다.

참 고 문 헌

- [1] J. F. Ziegler, Handbook of Ion implantation Technology, North Holland, 1992.
- [2] A. Hössinger, S. Selberherr, M. Kinura, I. Nomachi, and S. Kusanagi, "Three-Dimensional Monte Carlo ion implantation simulation for molecular ions," Electrochem. Soc. Proc., vol. 99-2, pp.18~25, 1999.
- [3] 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.
- [4] A. Hössinger, M. Radi, B. Scholz, T. Fahringer, E. Langer, and S. Selberherr, "Parallelization of a Monte Carlo ion implantation simulator for three-dimensional crystalline structures," Proc. of Simulation of Semiconductor Process and Devices, pp.103-106, 1999.
- [5] Andreas Hössinger, Erasmus Langer, and Siegfried Selberherr, "Parallelization of a Monte Carlo ion implantation simulator," IEEE Trans. Electron Devices, vol. 19, no. 5, pp.560~567, 2000.
- [6] 손명식, 단결정 실리콘에서의 이온 주입 분포 및 결함 분포에 대한 3차원 몬테 카를로 모델링 및 시물레이션, 박사학위 논문, 중앙대학교, 1998년 12월
- [7] G. Wang, Computationally Efficient Models for Monte Carlo Ion Implantation Simulation in silicon, Master's Thesis, The University of Texas at Austin, 1997.
- [8] UT-Marlowe Version 5.1 User's manual, 2000.

저 자 소 개

孫明植(正會員)

1992년 2월 : 중앙대학교 전자공학과 공학사. 1995년 2월 : 중앙대학교 전자공학과 공학석사. 1999년 2월 : 중앙대학교 전자공학과 공학박사. 1999년 3월~2001년 3월 : 세명대학교 전자공학과 및 컴퓨터응용과학과 강의 교수. 2001년 4월~현재 : 현재 동국대학교 밀리미터파 신기술 연구센터 연구교수로 재직 중. <주관심분야> 반도체 공정 소자 모델링 및 시뮬레이션이며, 현재 밀리미터파용 GaAs와 InP 기반의 pHEMT 소자 모델링을 통한 MIMIC 설계를 위한 고출력 저잡음 pHEMT 능동소자 라이브러리 구축에 대한 연구를 진행중임.

李鎮九(正會員) 第32卷 A編 12號 參照

현재 : 동국대학교 전자공학과 교수, 동국대학교 밀리미터파 신기술 연구센터 소장