

논문 2004-41SD-6-4

# 나노 스케일 확산 공정 모사를 위한 동역학적 몬테칼로 소개

## (An Introduction to Kinetic Monte Carlo Methods for Nano-scale Diffusion Process Modeling)

황 치 옥\*, 서 지 현\*\*, 권 오 섭\*\*, 김 기 동\*\*, 원 태 영\*

(Chi-Ok Hwang, Jihyun Seo, Ohseob Kwon, Kidong Kim, and Taeyoung Won)

### 요 약

본 논문에서는 나노 스케일 확산 공정 모사를 위한 방법으로 동역학적 몬테칼로(kinetic Monte Carlo)를 소개하고자 한다. 먼저 동역학적 몬테칼로의 이론과 배경을 살펴보고 실제적인 이해를 돕기 위하여 실리콘 기판에 이온(전자) 주입 후 열처리 과정에서 일어나는 점결함의 확산을 동역학적 몬테칼로를 이용하여 모사하는 간단한 예를 보여주고 있다. 동역학적 몬테칼로는 몬테칼로의 일종이지만 기존의 몬테칼로에서 구현하지 못하였던 물리적인 시간을 포아송 확률 과정을 통하여 구현하였다. 동역학적 몬테칼로 확산 공정 모사에서는 연속 확산 미분 방정식의 해를 구하는 기존의 유한 요소 수치 해석적 방법과 달리 원자 상호간 혹은 원자와 결함 또는 결함들 간의 화학적 반응과 입자들의 확산 과정을 포아송 확률 과정에 따라 일어나는 화학적 반응, 입자들의 확산 사건의 연속으로 본다. 사건마다 고유의 사건 발생 확률을 갖고 이 사건 발생 확률에 따라 일어나는 확률적 사건의 연속적 발생으로 실제의 반도체 확산 공정을 시간에 따라 직접적으로 모사할 수 있다. 입자들 간의 화학적 반응 사건 확률과 입자들의 확산 공정에 필요한 확률적 인자들은 분자 동역학, 양자 역학적 계산, 혹은 실험으로 얻어진다.

### Abstract

In this paper, we introduce kinetic Monte Carlo (kMC) methods for simulating diffusion process in nano-scale device fabrication. At first, we review kMC theory and backgrounds and give a simple point defect diffusion process modeling in thermal annealing after ion (electron) implantation into Si crystalline substrate to help understand kinetic Monte Carlo methods. kMC is a kind of Monte Carlo but can simulate time evolution of diffusion process through Poisson probabilistic process. In kMC diffusion process, instead of solving differential reaction-diffusion equations via conventional finite difference or element methods, it is based on a series of chemical reaction (between atoms and/or defects) or diffusion events according to event rates of all possible events. Every event has its own event rate and time evolution of semiconductor diffusion process is directly simulated. Those event rates can be derived either directly from molecular dynamics (MD) or first-principles (*ab-initio*) calculations, or from experimental data.

**Keywords** : kinetic Monte Carlo, Diffusion, Atomistic process, modeling

### I. 서 론

2001년 발표된 ITRS(International Technology Roadmap for Semiconductor)에 따르면, 2005년에는 100 나노미터 공정 기술이 실현될 것으로 예측하였으나 공정 기술의 지속적인 발전에 힘입어 현재 100 나노미터 이

하의 공정 기술이 이미 가능하게 되었다. 또한, 반도체 확산 공정에서 일어나는 제반 물리적 현상을 연속방정식 모델로 설명할 수 있다는 기존의 견지는 나노 스케일에서 점점 설득력을 잃어가고 있다. 이에 따라 소자를 구성하고 있는 원자들의 움직임을 직접 모사할 수 있는 원자 단위 공정 모사 기법이 필요하게 되었다. 이러한 관점에서 동역학적 몬테칼로(kinetic Monte Carlo)는 입자들의 상호작용에 따른 확산과정을 포아송 확률론적 과정으로 모사하여, 분자 동역학(molecular dynamics, MD), 양자 역학적 계산, 혹은 확산 실험에 의한

\* 정회원, \*\* 학생회원 인하대학교 전기공학과  
(Dept. of Electrical Eng. Inha Univ.)

※ 본 연구는 대학IT연구센터육성지원사업의 연구결과로 수행되었음.

접수일자: 2003년11월5일, 수정완료일: 2004년5월27일

데이터를 사용하여 확산 공정을 시뮬레이션 할 수 있는 대안으로 인식되고 있다.

원자 수준의 가장 직접적인 시뮬레이션 방법 중의 하나인 고전적 분자 동역학<sup>[1,2]</sup>은 지난 수 십 년 동안 컴퓨터상에서의 실험이라 불릴 만큼 빠른 알고리즘의 개발과 컴퓨터의 처리속도 그리고 저장 장치의 발전과 더불어 비약적인 발전을 거듭하여왔다. 그럼에도 불구하고 분자 동역학은 분자 상호간의 위치 에너지를 이용하여 힘을 매 시간 간격마다 계산하여 그 시간 간격동안 기본적으로 선형적인 외삽에 의하여 분자의 다음 위치를 정해 주어야 하므로 매 시간 간격이 짧을 수밖에 없다. 이로 인해 실제 반도체 공정 시간을 고려하기에는 시뮬 내기 할 수 있는 시간 규모(time scale)가 충분하지 않다는 한계를 갖게 되었다. 예를 들면 이온 주입 후의 불순물(dopants) 분산 시뮬내기의 실험 시간 규모는 길게는 하루까지 가는 반면 시뮬레이션에 사용되는 분자 개수에 따라 차이가 나겠지만 분자 동역학에서 현재 가능한 시간 규모는 마이크로 초를 넘지 않는다고 본다<sup>[3]</sup>.

이러한 분자 동역학의 시간 규모 한계를 극복할 수 있는 대안 중의 하나가 1990년 초반 경에 이론이 확립된 동역학적(kinetic or dynamic) 몬테칼로 방법이다<sup>[4]</sup>. 동역학적 몬테칼로는 기존의 몬테칼로 방식에서 몬테칼로 시간(Monte Carlo step, MCS)를 포아송 확률 과정(Poisson process)에 근거하여 실제적인 물리적 시간과 연계시킴으로서 시간에 따른 물리계의 동역학을 풀 수 있도록 한 것이다.

본 논문에서는 동역학적 몬테칼로의 이론과 그 배경을 고찰하고 동역학적 몬테칼로에 대한 이해를 돕기 위해 가장 간단한 예로서 이온 주입 후에 생성되는 격자 점결함(point defects)인 결공(vacancy)과 자기 틈새 원자(self-interstitial atom)가 열처리(annealing) 과정에서 확산되는 메커니즘을 살펴보도록 하겠다.

## II. 동역학적 몬테칼로

이 장에서는 몬테칼로의 일종인 동역학적 몬테칼로가 포아송 확률 절차를 시뮬레이션하였을 때 몬테칼로 시간이 실제 물리적인 시간이 된다는 사실을 고찰함으로써 동역학적 몬테칼로 방법의 이론과 그 배경<sup>[4]</sup>을 살펴보겠다.

기본적으로 몬테칼로 방법은 다음의 지배 방정식(master equation)을 푸는 동역학적 방법이라 말할 수

있다. 다음의 지배 방정식 (1)은 단위 시간 후에 어떤 물리계가 어느 하나의 물리 상태에 머무를 확률의 변화를 나타내는 방정식이다.

$$\frac{\partial P(\sigma_f, t)}{\partial t} = \sum_{\sigma_i} W(\sigma_i \rightarrow \sigma_f) P(\sigma_i, t) - \sum_{\sigma_j} W(\sigma_f \rightarrow \sigma_j) P(\sigma_f, t) \quad (1)$$

위의 방정식은 오른쪽 첫째 항이 다른 물리 상태에서  $\sigma_f$ 의 물리 상태로 들어오는 확률 변화를, 둘째 항이  $\sigma_f$ 의 물리 상태에서 다른 물리적 상태로 전이하는 확률 변화를 나타내는, 일종의 보존 법칙이라 하겠다. 여기서  $W$ 는 단위 시간 당 전이 확률이며  $\sigma_i$ 는 전이 전 물리계의 상태이며  $\sigma_f$ 는 전이 후의 물리계의 상태를 나타낸다.  $P(\sigma_i, t)$ 와  $P(\sigma_f, t)$ 는 각각 전이 전과 전이 후에 물리계가 그 상태에 머무를 확률이다. 동역학적 몬테칼로에서도 일반적인 몬테칼로 방식에서와 마찬가지로 위의 지배 방정식을 풀게 된다.

동역학적 몬테칼로에서, 전이 확률(transition rate)은 포아송 확률 과정의 이론에 따라 물리적 의미를 갖는 사건의 발생 확률(event rate)로 대체된다. 즉, 동역학적 몬테칼로에서는 임의의 물리계의 시간에 따른 변화는 시간에 따른 그 사건의 평균적 발생 확률(average event rate,  $R \equiv \{r_1, r_2 \dots r_n\}$ )을 갖는 구별되고 독립된 사건들( $E \equiv \{e_1, e_2 \dots e_n\}$ )의 연속적인 발생에 의하여 일어난다고 본다. 그러므로 동역학적 몬테칼로에서는 물리계의 변화가 시간 연대적으로 구별되는 확률론적 사건들의 연속으로 기술될 수 있다.

평균적 발생 확률  $r$ 은 다음과 같이 식 (2)로 정의될 수 있다.

$$r = \lim_{\delta \rightarrow 0, t \rightarrow \infty} \frac{n_\delta}{t} \quad (2)$$

여기에서 단위 시간 간격이  $\delta$ 일때,  $n_\delta$ 는  $n$ 번의 단위 시간( $t = n\delta$ )동안 발생한 사건의 수이다. 단위 시간 간격 동안 동일한 사건 확률  $r\delta$ 를 갖는다고 가정할 때 어느 시간  $t$  시간 동안  $n_e$ 번의 사건이 발생할 확률은 식 (3)과 같다.

$$P(n_e) = \left(\frac{n}{n_e}\right) (r\delta)^{n_e} (1 - r\delta)^{n - n_e} \quad (3)$$

위 식에서 단위 시간 간격  $\delta$ 가 0으로 근접하면( $\delta \rightarrow 0$ )

위 식 (3)은 다음과 같은 포아송 확률 과정 분포인 식 (4)가 된다.

$$P(n_e) = \frac{(rt)^{n_e}}{n_e!} e^{-rt} \quad (4)$$

또한, 포아송 확률 과정의 성질 중 하나는 개개의 포아송 확률 과정의 집합도 동일한 포아송 확률 과정을 갖는다는 것이다. 따라서 우리는 식 (5)을 얻을 수 있다.

$$P(n_e) = \frac{(\lambda t)^{n_e}}{n_e!} e^{-\lambda t} \quad (5)$$

여기에서  $\lambda = \sum_{i=1}^N r_i$ 이다. 따라서 연속되는 두 사건 사이의 시간에 따른 확률 밀도 함수는  $n_e=1$ 일 때 위의 확률 식에서 시간  $t$ 를 빼고 얻어지며  $f(t) = \lambda e^{-\lambda t}$ 이다.

한 사건의 발생에 따른 시간의 경과와 같은 누적 확률 밀도 함수 식 (6)를 통하여 얻어질 수 있다.

$$\int_0^{\tau} dt \lambda e^{-\lambda t} = 1 - e^{-\lambda \tau} \quad (6)$$

시간에 대한 누적 확률 밀도 함수 수식으로부터 난수  $U \in (0, 1)$ 를 발생시켜 사건의 발생에 따른 시간을 식 (7)과 같이 임의 추출할 수 있다.

$$\tau = \frac{-\ln U}{\lambda} \quad (7)$$

포아송 확률 과정을 따르는 물리계가 이루고 있는 사건 가운데 어떠한 사건이 발생할 것인가는 포아송 확률 과정의 임의 추출 방식으로 할 수 있다. 이제 우리는 동역학적 몬테칼로의 알고리즘을 만들 수 있는 위치에 와 있다.

- ① 우선 시간을 초기화하고(보통  $t=0$ ) 모든 가능한 사건 발생 확률을 정의한 후 모든 사건 발생 확률의 합  $\lambda = \sum_{i=1}^N r_i$ 을 얻는다.
- ② 난수  $U \in (0, 1)$ 를 발생시켜 다음을 만족하는  $v$ 번째 사건을 선택한다.  $\sum_{i=0}^{v-1} r_i \leq U\lambda < \sum_{i=0}^v r_i$
- ③ 선택된 사건을 수행한다.
- ④ 선택된 사건의 수행으로 인해 발생할 수 있는 사건 발생 확률의 변화에 따라 사건 발생 확률의 합을 갱신한다.

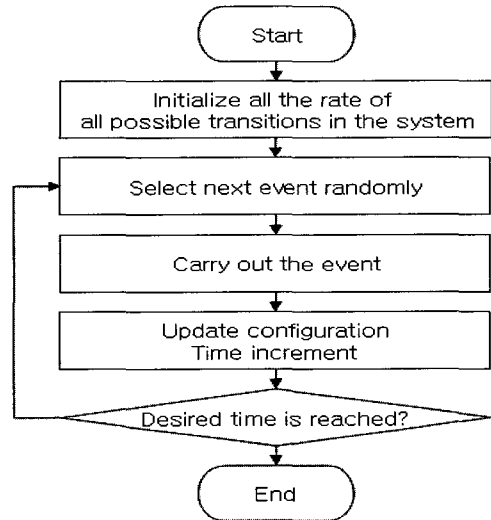


그림 1. 동역학적 몬테칼로 알고리즘 순서도  
Fig. 1. Kinetic Monte Carlo Flow Chart.

- ⑤ 난수  $U \in (0, 1)$ 를 발생시켜  $-\ln U/\lambda$ 에 따라 시간을 증가시킨다.
- ⑥ 알고리즘 2번으로 돌아가 원하는 시간(열처리 시간)까지 반복한다.

특히, 동역학적 몬테칼로 알고리즘 ②번을 살펴보면, 사건의 개수가 많아짐에 따라 사건을 임의 선택하는데 시간이 많이 걸리게 됨을 알 수 있다.  $N$ 개의 사건이 있을 때 선형적인 사건 선택 방법을 사용할 경우  $O(N)$ 의 시간이 걸리게 되며 또한 동역학적 몬테칼로 알고리즘을 실행하는 과정에서 사건 발생 확률의 변화에 따라 발생 확률에 관계되는 자료구조를 매번 변경해야 한다는 문제가 발생한다. 이러한 사건 선택 방법과 자료 구조 변경에 따른 시간을 향상시키기 위해 새로운 컴퓨터 공학적인 사건 선택 방법과 자료 구조가 적용되고 있다<sup>[5]</sup>. 이러한 방법 중에서 이진트리(binary tree) 방법이 점근선적(asymptotically)으로 가장 빠르다.

주어진  $N$ 개의 사건 중에서 사건을 임의 선택할 때 이진 트리를 구성하는 방법은 다음과 같다<sup>[5]</sup>. 편의성을 고려하여  $N=2^k$ 라고 가정하였을 때  $T_j^{(1)} = r_j$ 라 놓고 반복적으로 다음과 같이  $k$  레벨을 정의한다.

$$T_j^{(k)} = T_{2j-1}^{(k-1)} + T_{2j}^{(k-1)}, k = 2, 3, \dots, K. \quad (8)$$

여기에서  $T_1^{(K+1)} = \lambda$ 가 됨을 주의하기 바란다. 사건 선택은  $j=1$ 과  $k=K$ 에서 시작하고 반복적으로  $U \leq T_{2j-1}^{(k-1)}$ 이면 선택될 사건은 왼쪽 트리에 있게 된

다.  $j=2j-1$ 로 놓는다. 그렇지 않다면  $U$ 에서  $T_{2j-1}^{(k-1)}$ 를 빼고  $j=2j$ 로 놓는다.  $k=k-1$ 로 놓고 반복하며  $k=1$ 이 될 때까지 한다. 사건 자료 구조를 갱신하는 것은  $k=1$ 로 시작하여  $k=K$ 가 될 때까지 반복적으로 갱신시키며 사건 선택과 사건 자료 구조 갱신에 드는 시간은  $O(K)=O(\log_2 M)$ 이다.

III. 동역학적 몬테칼로 : 점결합(I,V) 확산 모델

이 장에서는 동역학적 몬테칼로 방법에 대한 이해를 돕기 위해 간단한 예로서 이온 주입 후에 생성되는 점결합인 결공과 자기 틸새 원자의 열처리에 따른 확산 현상에 대한 메커니즘을 살펴해보도록 하겠다<sup>[6]</sup>. 이온 주입과 이온 주입 후 열처리 과정을 통하여 가장 기본적인 결함인 점결합은 점결합들 간의 결합, 주입된 이온들과 점결합 사이의 상호 작용 등에 따라 많은 복잡한 화합물들이 생성되며 열처리 시간에 따라 동역학적으로 변해간다. 그러나, 참고 문헌 [6]에서 사용된 예에서와 같이 다음의 예에서는 동역학적 몬테칼로를 소개한다는 의미에서 주입된 이온을 실리콘으로 생각하여 주입된 원자와 기판 원자와의 충돌로 발생한 점결합들은 집단(clustering)이 일어나지 않고 단지 점결합만이 서로 상호 작용만을 고려한 가장 간단한 확산모델을 보여주도록 하겠다<sup>[6]</sup>.

실리콘 기판에 가속화된 이온을 주입했을 때 주입된 이온과 실리콘 기판 원자들과의 충돌에 의해 격자에 있던 실리콘 원자가 본래의 위치를 이탈하여 실리콘 격자 사이에 존재하게 될 때 기존의 실리콘 원자가 있던 자리는 비어 결공이 되고 격자 사이에 존재하는 실리콘 원자는 자기 틸새 원자가 된다. 본래의 자리를 이탈한 자기 틸새 원자는 이온 주입 후의 열처리 과정에 의해 결공의 위치로 돌아가 재결합(recombination)을 통해 재결정화(recrystallization)가 이루어진다. 이러한 재결합 과정은 동역학적 몬테칼로에 의해 쉽게 모사가 가능하다. 동역학적 몬테칼로 방법에서는 격자에 존재하는 실리콘 원자는 시뮬레이션되지 않고 오직 결공과 자기 틸새 원자만이 고려되며 사건 발생률과 장벽 에너지(migration or barrier energy)가 결공이나 자기 틸새 원자의 이동률(jump or migration rate)을 식 (9)와 같이 결정짓는다.

$$\omega = \omega_0 e^{-E_m / K_B T} \tag{9}$$

표 1. 자기 틸새 원자와 결공의 분산 계수와 장벽 에너지

Table 1. Diffusivity and potential energy (interstitial and vacancy).

분산 계수 (cm <sup>2</sup> /s)		장벽 에너지 (eV)	
D <sub>m_V</sub>	0.001282	E <sub>m_V</sub>	0.1
D <sub>m_I</sub>	1.717	E <sub>m_I</sub>	1.37

여기에서  $\omega_0$ 는 시도율(attempt frequency)이라 볼 수 있으며 기본적으로 격자 원자 진동수에 해당하며  $E_m$ 은 이동에 따른 장벽 에너지이고  $K_B$ 는 볼츠만 상수,  $T$ 는 온도이다. 본 논문에서 컴퓨터 시뮬레이션을 한 자기틸새원자와 결공의 이동률들<sup>[7,8]</sup>은 다음과 같다.

본 논문에서 제시한 동역학적 몬테칼로 예에서는 결공과 자기 틸새 원자의 한번의 이동 거리는 실리콘 격자에서 실리콘 원자 사이의 최소 근접거리인 2.35 Å이며 이동 방향은 6개의 자유도를 가진다. 또한 결공과 자기틸새 원자가 4 Å 거리 이내에 있을 때 만날 확률을 '1'로 한다.<sup>[6]</sup> 즉, 재결합 시 화학적 장벽 에너지는 없다고 가정하며 이러한 화학 반응은 확산 제한적(diffusion-limited) 반응이라 일컫는다. 재결합이 일어나면 자기틸새원자가 결공의 위치로 들어가 실리콘 격자원자가 되어 복구되는 것으로 생각한다. 이는 프로그램상에서는 입자의 소멸로 처리된다. 결공과 자기틸새 원자의 분산과 재결합의 동역학적 알고리즘은 다음과 같다.

- ① 시간을  $t=0$ 로 초기화 하고 결공과 자기틸새 원자의 개수  $N_v, N_I$ 에 따라 결공과 자기틸새 위치를 초기화하고 사건 발생 확률  $\omega_v, \omega_I$ 의 합  $\lambda_v = N_v \omega_v, \lambda_I = N_I \omega_I$ 와  $\lambda = \lambda_v + \lambda_I$ 을 얻는다.
- ② 난수  $U \in (0, 1)$ 를 얻어  $U\lambda$ 가  $\lambda_v$ 보다 작으면 임의의 결공을 크면 임의의 자기틸새 원자를 이동시킨다.
- ③ 이동시킨 결공과 자기틸새 원자가 이웃한 다른 종류와의 거리가 4 Å 이내이면 재결합시키고  $N_v = N_v - 1, N_I = N_I - 1$ 으로 이에 따른  $\lambda_v, \lambda_I$  값을 갱신한다.
- ④ 난수  $U \in (0, 1)$ 를 발생시켜  $-\ln U/\lambda$ 에 따라 시간을 갱신한다.

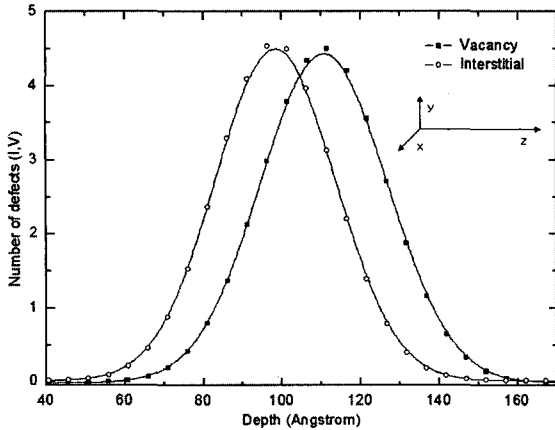


그림 2. Si 이온 주입 후, 생성되는 결함 분포의 깊이  
에 따른 가우스 분포  
Fig. 2. A plot showing the profile after Si implanta-  
-tion into Si substrate.

⑤ 계산 과정 2번으로 돌아가 원하는 열처리 시간이  
될 때까지 반복한다.

그림 2는 실리콘 기판 위에 실리콘 입자를 주입하여  
생기는 깊이에 대한 점결함의 분포가 가우스 분포를 따  
른다고 가정하였을 때의 분포도이다. 결공과 틸새원자  
의 평균 깊이는 각각 110Å, 100Å에 위치하고 표준편  
차는 각각 30Å이라고 가정한다. 결공과 틸새원자의 평  
균값의 차이는 이온의 차내기(kick-out)에 의한 현상에  
의해 나타날 수 있다고 본 것이다.

결공과 자기틸새 원자의 확산과 재결합의 동역학적  
모사를 수행하기 위해서 수평방향(x, y)에 대해서는 주  
기적인 경계조건을 사용하였으며 이동한 입자가 표면  
(z=0)에 도달했을 경우는 더 이상 확산을 하지 않는 싱  
크(sink) 경계 조건을 사용하여 시뮬레이션 대상에서  
제외된다. 즉, 실리콘 원자의 표면 밖으로 튀어나가서  
발생하는 표면 성장 효과는 고려하지 않았다.

실리콘의 원자밀도는 0.05 atoms/Å<sup>3</sup> 이고 결함이 깊  
이 방향(z)에 대하여 가우스 분포를 이루고 있으므로  
표준편차(30Å) 내에 총 결함 수의 68%가 존재하게 된  
다. 실리콘 원자 개수 밀도의 0.01%의 결함이 생기도록  
가정했을 때 x, y에 대한 시뮬레이션 크기와 결함의 개  
수를 식 (10)과 같이 결정할 수 있다.

$$\rho = \frac{0.68N}{X^2 \times 30 \times 0.05} = 0.01\% \quad (10)$$

결함의 개수를 176개가 되도록 했을 때 x, y 방향의  
크기는 각각 893.2Å으로 계산된다.

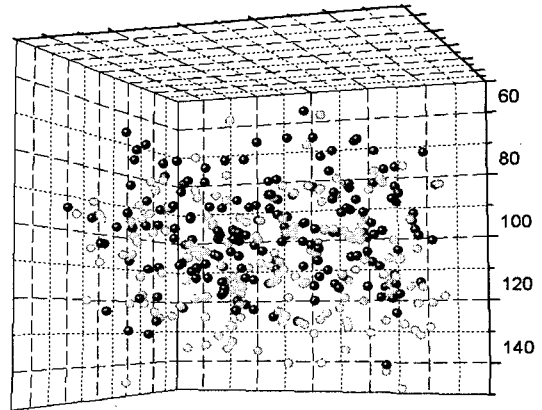


그림 3. 이온 주입 후의 생성되는 결함의 3차원  
분포 (검은 점은 자기 틸새 원자를 회색  
점은 결공을 나타낸다)  
Fig. 3. A plot showing three dimensional defect  
distribution (black particles represent  
interstitials and grey ones vacancies.)

그림 3은 이온주입에 따른 깊이에 대한 1차원적 결함  
분포를 3차원적 분포로 치환한 결과이다. 깊이방향에  
대해서는 1차원적 분포와 같이 가우스 분포를 따르며  
수평방향에 대해서는 계산된 시뮬레이션 크기 내에서의  
임의의 값을 생성시켜 분포를 균일하게 하였다

그림4는 시뮬레이션 후의 열처리 시간에 따른 결함  
의 개수를 보여주고 있다. 마지막으로 남아있는 (틸새  
원자) 원자의 경우 각각 10<sup>13</sup>fs(a)와 10<sup>11</sup>fs(b)에서 사라  
지며 온도에 대한 영향력을 나타내고 있다. 또한 본 시  
뮬레이션 결과의 검증을 위해서 입자의 평균거리에 대  
해 표면에서의 소멸 시점을 조사해 보았다. 우선 각각  
의 입자에 대한 이동률,  $r(T)$ 은 다음 식 (11)과 같이  
된다.

$$r(T) = 6D/\lambda^2 = \omega_0 \exp(-E_m/KT) \quad (11)$$

그리고, 아인슈타인 관계식(Einstein relationship;  
 $\Delta \bar{R}^2 = 6Dt$ )에 의해 입자가 표면에 도달하기까지의  
평균 시간을 식 (12)과 같이 구해보면 다음 <표 2>와  
같다.

$$t = \frac{\Delta \bar{R}^2}{\lambda^2 \cdot \omega_0 \exp(-E_m/KT)} \quad (12)$$

표 2에서 보듯이 계산된 평균 도달시간의 값과 시뮬  
레이션에 의해서 얻어진 결과 값이 일치함을 알 수 있  
다. 이로써 시뮬레이션의 결과를 어느 정도 신뢰할 수  
있으며 또한 참고 문헌 [6]에서의 결과를 이 논문에서

표 2. 자기 틸새 원자와 결공의 평균 표면 도달 시간  
Table 2. Average surface-arriving time of defects (self-interstitial and vacancy)

결함 종류		자기 틸새원자	결공
평균	1000K	$8.4 \times 10^9$ (fs)	$5.5 \times 10^6$ (fs)
도달시간	1300K	$2.2 \times 10^8$ (fs)	$4.2 \times 10^6$ (fs)

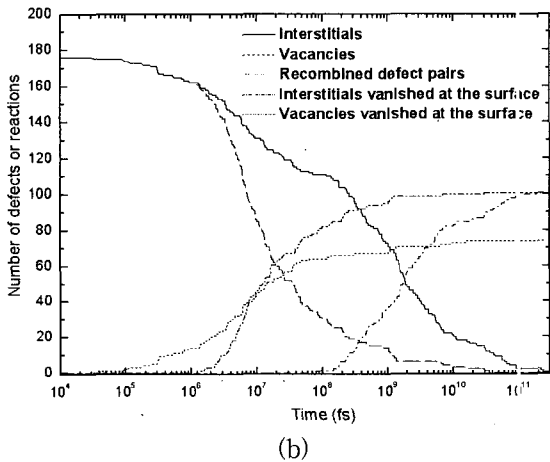
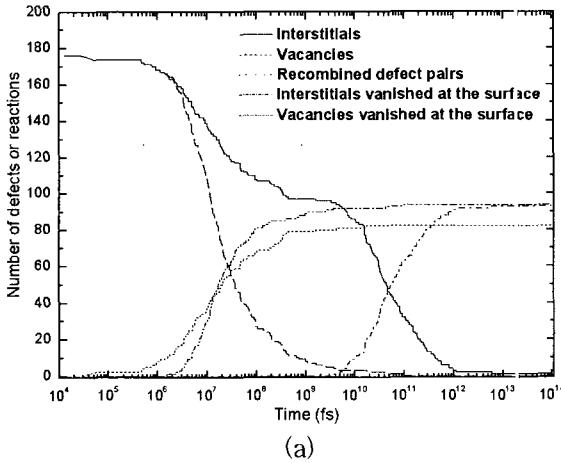


그림 4. 1000 K (a), 1300 K (b)에서 열처리 할 때 자기 틸새 원자와 결공의 시간적 분포

Fig. 4. A plot showing defects (interstitials and vacancies) annealing profile at temperatures 1000K (a), 1300K (b).

는 보여주지는 않았지만 참고문헌 [6]의 결과와도 일치함을 확인하였다.

본 논문에서 예로 든 점결함의 확산 과정뿐만 아니라 복잡한 다른 종류의 결함과 불순물(B, As, F)들과의 상호 작용을 고려한 열처리 과정에서 일어나는 확산 과정에 대한 시뮬레이션도 동력학적 몬테칼로 방법을 이용하여 많은 연구가 진행되고 있다<sup>[7,8,9]</sup>.

#### IV. 결 론

나노 스케일의 소자 개발을 위한 전산 모사에서 유한 요소법이 한계에 부딪힘에 따라 원자 단위 전산 모사의 필요성이 제고되어 왔다. 본 논문에서는 원자 단위 전산 모사의 원조격인 분자동력학의 시간 규모 문제를 해결하는 대안으로 동력학적 몬테 칼로의 이론과 배경을 소개하고 있다. 또한 전자 주입 후 결공과 자기틈새 원자의 열처리 후에 일어나는 확산과 재결합에 대한 간단한 동력학적 몬테칼로 모사를 통하여 동력학적 몬테 칼로에 대한 이해를 돕고자 하였다.

#### 참 고 문 헌

- [1] M. P. Allen and D. J. Tildesley, "Computer simulation of liquids", Clarendon Press, 1987.
- [2] K. Refson, "Moldy: a portable molecular dynamics simulation program for serial and parallel computers", Comput. Phys. Commun., Vol. 126, pp310-329, 2000.
- [3] A. F. Voter, F. Montalenti and T. C. Germann, "Extending the time scale in atomistic simulation of materials", Annu. Rev. Mater. Res., Vol. 32, pp321-346, 2002.
- [4] K. A. Fichtorn and W. H. Wienberg, "Theoretical foundations of dynamical Monte Carlo simulations", J. Chem. Phys., Vol. 95(2), pp. 1090-1096, July 1991.
- [5] J. L. Blue, I. Beichl and F. Sullivan, "Faster Monte Carlo simulations", Phys. Rev. E, Vol. 51(2), ppR867-R868, Feb. 1995.
- [6] D. Johnson's notes in web : simulation methods in atomic-scale physics, <http://www.acclab.helsinki.fi/~knordlun/mc/>
- [7] M. Jaraiz, G. H. Gilmer, J. M. Poate and T. D. de la Rubia, "Atomistic calculations of ion implantation in Si: point defect and transient enhanced diffusion phenomena", Appl. Phys. Lett., Vol. 68(3), pp409-411, Jan. 1996.
- [8] L. Pelaz, L. A. Marques, G. H. Gilmer, M. Jaraiz and J. Barbolla, "Atomistic modeling of the effects of dose and implant temperature on dopant diffusion and amorphization in Si", Nucl. Instr. and Meth. B, Vol. 180, pp12-16, 2001.
- [9] M. J. Caturla, "Toward a predictive atomistic model of ion implantation and dopant diffusion in silicon", Comput Mater. Sci., Vol. 12, pp319-332, 1998.

저 자 소 개



황 치 옥(정회원)  
 1988년 서울대학교 천문학과  
 이학사 졸업  
 1991년 서울대학교 천문학과  
 석사 졸업  
 1996년 University of Southern  
 Mississippi, 물리학과 이학  
 석사 졸업

1999년 University of Southern Mississippi,  
 계산과학 이학박사 졸업

2002년 Florida State University, 박사 후 연수과정

2003년 한양대학교 방사선 안전 신기술 연구 센터,  
 연구 교수

2003년~현재 인하대학교 컴퓨터이셔널  
 일렉트로닉스센터 객원 교수

<주관심분야: 반도체 공정 물리 및 시뮬레이션, 이  
 온주입 및 확산공정 모델링, 나노-스케일 소자 모델  
 링>



서 지 현(학생회원)  
 2003년 인하대학교 전자공학과  
 공학사 졸업.  
 2003년~ 현재 인하대학교 전기  
 공학과 석사과정 재학중.  
 <주관심분야: 반도체 확산공정 모델  
 링 및 시뮬레이션>



권 오 섭(학생회원)  
 1997년 인하대학교 전자재료  
 공학과 공학사 졸업.  
 1999년 인하대학교 전자재료  
 공학과 공학석사 졸업.  
 1999년~현재 인하대학교 전자재료  
 공학과 박사과정 재학 중.

<주관심분야: 반도체 공정 물리 및 시뮬레이션, 이  
 온주입 및 확산공정 모델링, 나노-스케일 소자 모  
 델링>



김 기 동(학생회원)  
 2003년 인하대학교 전기공학과  
 공학사 졸업.  
 2003년~ 현재 인하대학교 전기  
 공학과 석사과정 재학중.

<주관심분야 : 나노-스케일 소자 모  
 델링 및 시뮬레이션>



원 태 영(정회원)  
 1981년 서울대학교 전자공학과  
 공학사 졸업.  
 1983년 한국과학기술원 전기 및  
 전자공학과 공학석사 졸업.  
 1989년 미국 University of Illinois  
 at Urbana- Champaign 전  
 자공학과 공학박사 졸업.

1989년 미국 State University of New York  
 조교수.

1990년 삼성전자(주) 수석연구원.

1991년~현재 인하대학교 공과대학 전자전기공학  
 부교수.

<주관심분야: 반도체 소자 및 공정, TFT-LCD,  
 MEMS 모델링 및 시뮬레이션 코드 개발>