

BEM을 이용하여 열산화를 고려한 실리콘 내에서 불순물의 2차원 재분포에 관한 연구

김 훈 황 호 정

중앙 대학교 전자공학과

Two-dimensional Redistribution of Impurity

considering Thermal Oxidation in silicon using BEM

Kim Hun and Hwang Ho Jung
Dept. of Electronic Eng. Graduate School of
Chung-Ang University Seoul, Korea

ABSTRACT

This paper is concerned with the investigation of the impurity redistribution process in a two step diffusion. In integrated circuit technology, two step boron diffusion involving a deposition step followed by a drive-in step is commonly encountered. The drive-in process is usually performed in oxidizing atmosphere resulting in redistribution of impurity (boron) within the semiconductor. This paper proposes a new numerical analysis method; Boundary Element Method to determine impurity profile at the arbitrary point in domain by its coordinate and boundary value.

I 서 론

반도체 소자가 소형화 되고 고성능화 되면서 실험적인 연구는 많은 시간과 비용을 필요로 하게 된다. 따라서 높은 정밀도를 가지면서도 물리적인 제약이 없는 computer를 이용한 수치적인 해석이 널리 연구되고 있다. 소자 제작을 위한 불순물을 doping하는 thermal diffusion 즉 two-step 확산인 predeposition과 정교 산소 gas 속에서의 drive-in 과정 동안에 일어나는 불순물의 2차원적 재분포에 관한 여러 가지 수치 해석법이 제시되었으나 본 논문에서는 2차원적으로 불순물 분포를 구하기 위한 새로운 수치 해석법인 경계 요소법 BEM (Boundary Element Method)을 적용하였다. [1],[2],[3],[4],[5] 이 방법은 차분 근사법(Finite Difference Method)이나 유한 요소법(Finite Element Method)에 비해 요소 분할이 간편하고 절점 수의 요소 차원등에 있어 장점을 갖는다. II장에서는 BEM을 적용하기 위한 경계 조건의 설정과 불순물 확산에 대한 물리적 고찰 그리고 two-step 확산에 대하여 설명하였다. III장에서는 BEM을 이용한 확산 방정식의 이산화 과정 및 Simulation 결과를 gaussian function 및 analytic 한 연산 결과 등과 비교 설명하였다.

II. 불순물 확산의 물리적 개념

1. 불순물 확산 [6]

격자내에서 불순물의 wandering 은 일련의 random한 jumps에서 일어난다. 이러한 jumps는 interstitial mechanism, substitutional mechanism, interstitial-substitutional mechanism에 의해 일어난다.

(1) 확산 방정식

결정속에서 양이온화된 불순물의 움직임으로 flux F를 고려하면

$$F = -D \frac{\partial C}{\partial x} + \mu EC \quad (1)$$

(D:diffusivity, μ :mobility, E:전계, C:불순물 농도)

position x와 position x + x에서의 planes에 의해 경계지워진 element속에서 불순물이 형성되거나 소모되지 않는다고 가정하면

$$\Delta x \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = F(x) - F(x+x) \quad (2)$$

$$\bar{C} \rightarrow C(x), \text{ and } \frac{F(x+\Delta x) - F(x)}{\Delta x} \longrightarrow \frac{\partial F}{\partial x} \quad (3)$$

(\bar{C} : 평균 농도)

x - 0 로 놓으면

따라서

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial F}{\partial x} \quad (4)$$

diffusivity는 비교적 낮은 온도 (<10⁶)에서는 농도에 대해 상수가 되고 단지 온도에 따라 변화한다. 이런 가정속에서

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \mu E \frac{\partial C}{\partial x} \quad [E=const] \quad (5)$$

전계 E=0로 가정하면 확산방정식은

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (6)$$

(6)식에서 D같은 온도에 따른 상수값이다.

$$D = D_0 \exp(-E_a/kT) \quad (7)$$

(E_a:activation energy, T:절대온도)

(2) Thermal diffusion

1 The predeposition 단계

predeposition 과정은 대개 furnace 에 반도체 wafer 를 놓고 원하는 불순물을 포함한 inert gas를 흐르게 함으로써 실행되며 그 온도는 800-1200 °C이다. 불순물을 carrier gas에 유입하는 방법에는 solid source, liquid source, chemical transport등이 있다.

여기서 주어진 시간과 거리에서 불순물 농도는

$$N(x,t) = N_0 \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \quad (8)$$

N₀:실리콘 표면에서 불순물 농도
D :특정한 확산 온도에서 확산계수

이러한 형태의 확산의 가장 큰 특징은 확산 깊이가 시간과 함께 증가하는데 반하여 표면 농도는 일정하다. 이같은 형태의 확산은 complementary error function 을 따른다.

2 drive - in 확산

이 단계는 전체 불순물의 증가없이 반도체속으로 움직이는 단계인데 이러한 일차리는 보통 oxidizing ambient에서 실행된다. 대부분 불순물들은 실리콘 산화막보다 실리콘에서 더 빨리 확산된다. 그래서 열처리가 oxidizing ambient속에서 실행되어진다면 생성된 산화층이 불순물을 봉인하는 경향을 갖는다. 즉 산화층이 불순물의 확산에 대해 효과적인 mask로서의 역할을 하기 때문에 더 이상의 불순물을 첨가하지 않고도 많은 양의 불순물이 빠져나가지 않게된다. 이 단계에서의 불순물 농도는 식 (9) 와 같이 표현할수있다.

$$N(x, t) = \frac{Q_0}{\sqrt{\pi Dt}} \text{Exp}(-x/2\sqrt{Dt})^2 \quad (9)$$

여기서

$$Q_0 = 2N_s(t, t_0) \sqrt{\pi Dt} \quad (10)$$

- Q: predeposition 동안 용입된 물질의 양
- D: predeposition 온도에서 확산 계수
- t: drive - in 단계에서의 확산 계수
- N_s: predeposition 온도에서 표면 농도

(3) 열산화를 고려한 불순물의 재분포 [7]-[10]

실제 drive-in 확산 과정에서는 SiO₂-Si 경계면의 이동과 segregation 상수 (R) 및 산화층을 통해 외부로 빠져나가는 요소가 함께 고려 되어야하므로 매우 복잡한 상관관계를 이루고 있다.

$$k = \frac{\text{평형상태에서 Si 내의 불순물}}{\text{평형상태에서 SiO 내의 불순물}} \quad (11)$$

만약 oxide에서 불순물의 diffusivity가 작다면 외부로 유출 되는 요소는 실리콘에서 불순물 재분포에 크게 영향을 미치지 않게 된다. analytical 한 해는 SiO₂-Si 경계에서 불순물 원자의 흐름이 없고 단지 경계만 이동할 때 다음과 같이 나타내고 있다. [7]

$$C_s(x, t) = \frac{Q}{\sqrt{\pi Dt}} \text{Exp} \left[-\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} + \frac{m\sqrt{B}}{2\sqrt{D}} \right)^2 \right] \quad (12)$$

여기서, $Q = 2C_s \frac{\sqrt{Dt}}{\sqrt{\pi}}$ (13)

- Q: 단위 면적당 총 불순물의 원자
- m: oxidation 동안 소모된 실리콘의 두께와 oxide 두께의 비
- B: parabolic 상수

Oxide 층의 성장과 더불어 segregation 상수가 고려 되었을 때 oxide 를 통하여 위치에 따른 불순물의 농도는 다음과 같이 표현된다.

$$C_s(x, y) = -\frac{(k-m)\sqrt{\pi B}}{2\sqrt{D}} \text{Exp} \left[\frac{m\sqrt{B}}{2\sqrt{D}} \right] + X C_s \text{erfc} \left[\frac{x}{2\sqrt{Dt}} + \frac{m\sqrt{B}}{2\sqrt{D}} \right] \quad (14)$$

상기 두 식으로부터 Si내의 불순물 분포가 구해진다.

$$C(x, t) = \frac{Q}{\sqrt{\pi Dt}} \text{Exp} \left[-\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} + \frac{m\sqrt{B}}{2\sqrt{D}} \right)^2 \right] - \frac{(k-m)}{2} \frac{\sqrt{\pi B}}{\sqrt{D}} \text{Exp} \left[\frac{m\sqrt{B}}{2\sqrt{D}} \right] * C_s \text{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} + \frac{m\sqrt{B}}{2\sqrt{D}} \right) \quad (15)$$

첫 식에서 x=0로 놓음으로써 표면 농도 C(0, t) 가 결정된다.

2. 경계 조건

경계 조건을 구하기 위해서 Fig.1과 같은 기하학적인 Device 구조를 가정한다. 2차원적 불순물 분포를 구하기 위해 확산 방정식을 수치 해석적으로 푸는 데 있어서 확산계수가 농도에 따라 일정하다는 가정 아래 linear한 확산 방정식을 해석한다.

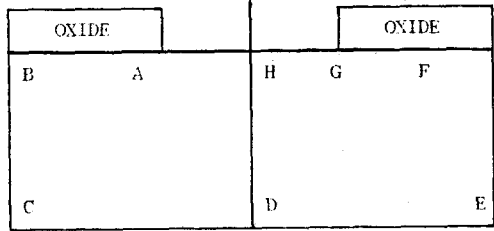


Fig.1 Device의 기본 구조

Fig.1에서 보면 Device는 HD를 축으로 대칭이므로 해석할때는 한쪽면 ABCDHA 만을 고려하면 된다. 불순물을 주입하는 각 과정에서 필요한 경계 조건을 여기서 구할 수 있다. Predeposition과정에서 경계 ABCD에서는 Neumann조건을 만족하고 경계 HA에서는 Dirichlet조건을 만족한다. Thermal Oxidation이 일어나는 Drive-in과정에서는 경계 ABCDH는 Neumann조건을 만족하고 경계 HA는 Dirichlet조건을 만족한다. Drive-in과정에서 경계 HA의 경계값은 Thermal Oxidation동안 확산된 층에서 불순물의 Redistribution 을 나타내는 (15)식에 의해 구해질 수 있다. 이같은 경계 조건들은 BEM을 적용하는데 이용된다. 본 논문에서 적용한 Process parameter 는 Fig.2와 같다.

Oxide Thickness	35 nanometer
Device Width	2.5 micrometer
Window Length	1.5 micrometer
Surface Doping	1.5 E+19 cm
Impurity	Boron
Temperature	
Predeposition	1373 K
Drive-in	1173 K
Time	
Predeposition	1200 sec
Drive-in	3600 sec

Fig.2 Device Parameter

III. Model 의 수치 해석

이 장에서는 본 논문에서 적용한 수치 해석법인 경계 요소법을 이용하여 이산 화하는 과정을 기술한다.

1 BEM 을 이용한 이산화.

경계 요소법을 이용한 이산화는 unsteady state 한 확산 방정식을 수치적으로 해석 한다. 시간의 변화에 대한 Time Marching을 방법에 따라 2가지로 나눌 수 있는데 본 논문에서는 이 두 방법에 관한 수치 선계를 하였으며 computer program은 Time Marching II 에 의해 실행하였다.

(1) Time Marching I

확산 방정식에서 변수 C를 U로 대체하여 확산 방정식을 쓰면

$$\frac{\partial U}{\partial t} = D \nabla^2 U \quad (16)$$

(16)식을 Green정리 를 이용해서 풀면, 시간은 $t_{r-1} \leq t \leq t_r$.

$$\int_{t_0}^{t_f} \int_{\Omega} [U(P, t) U^*(P, P', t_f, t) - U^*(P, P', t_f, t)] d\Omega dt + \int_{t_0}^{t_f} \int_{\Omega} [U(Q, t) q(Q, P, t, t) - U(Q, P, t, t)] d\Omega dt \quad (17)$$

(17)식에서 U^* 는

$$U^*(x, y, t) = \frac{1}{4D\pi\tau} \exp\left[-\frac{r(x, y)}{4D\tau}\right] H(\tau) \quad (18)$$

$$H(\tau) = \begin{cases} \tau > 0; & 1 \\ \tau < 0; & 0 \end{cases}$$

로 표시되는 fundamental solution 이며 $r(x, y)$ 는 x 와 y 로 표시되는 두 점사이의 거리를 의미한다. 또 P, P' 는 영역내의 점이고 Q, Q' 는 경계상의 임의의 점과 기준점을 의미하며 q 는 U 의 normal성분의 비분율의 Dirac의 delta function이 갖는 성질을 이용한다.

$$D\nabla^2 U^*(P, P', t_f, t) + \frac{\partial U^*(P, P', t_f, t)}{\partial t} + (P, P') (t, t) = 0 \quad (19)$$

$$\int_a^b f(\xi) \delta(x, y) dx = \begin{cases} f(\xi) & a < \xi < b \\ 0 & \xi < a, \xi > b \end{cases} \quad (20)$$

이 식을 (17)식에 대입하면 좌변의 식은

$$\begin{aligned} & 1/D \int_{t_0}^{t_f} \int_{\Omega} [U(P, t) \left\{ -\frac{\partial U^*}{\partial t} - \delta(P, P') \delta(t_f, t) \right\} - \\ & \quad U^*(P, P', t_f, t) \frac{\partial U}{\partial t}] d\Omega dt \\ & = -1/D \int_{\Omega} U^* \Big|_{t_f} \Big|_{t_0} d\Omega - 1/D U(P', t_f) \\ & = -1/D \int_{\Omega} U^* \Big|_{t=t_0} d\Omega - 1/D U(P', t_f) \end{aligned} \quad (21)$$

따라서 (21)식은 다음 식으로 표현된다.

$$U(P', t_f) + D \int_{t_0}^{t_f} \int_{\Omega} U q^* d\Omega dt = D \int_{t_0}^{t_f} \int_{\Omega} q U^* d\Omega dt + \int_{\Omega} U U^* \Big|_{t=t_0} d\Omega \quad (22)$$

이제 영역내의 기준점 P 를 경계상의 기준점 Q' 로 대체한 뒤 (19)식을 이용하여 경계 적분 방정식을 만든식은

$$\begin{aligned} & 1/2 U(Q', t_f) + D \int_{t_0}^{t_f} \int_{\Omega} U(Q', t) q^*(Q, Q', t_f, t) d\Omega dt \\ & = D \int_{t_0}^{t_f} \int_{\Omega} q(Q, t) U^*(Q, Q', t_f, t) d\Omega dt \\ & \quad + \int_{\Omega} U(P, t_0) U^*(Q, Q', t_f, t_0) d\Omega \end{aligned} \quad (23)$$

시간 구간 $t_f \leq t \leq t_f$ 에 대하여 (23)식을 적분하고 또한 U 와 q 값이 각 time 구간에서 일정한 값을 갖는다 가정하면

$$\begin{aligned} q^* = \frac{\partial U^*}{\partial n} = \frac{\partial U^*}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial n} &= -\frac{r}{8D\pi(t_f, t)^2} \exp\left[-\frac{r^2}{4D(t_f - t)}\right] \frac{\partial r}{\partial n} \\ \int_{t_f}^{t_f} q^* dt &= \frac{r}{2D} \int_{t_f}^{t_f} \frac{1}{4D(t_f - t)^2} \exp\left[-\frac{r^2}{4D(t_f - t)}\right] dt \frac{\partial r}{\partial n} \\ &= -\frac{1}{2\pi D r} \exp\left[-\frac{r^2}{4D(t_f - t_f)}\right] \frac{\partial r}{\partial n} \end{aligned} \quad (24)$$

$$\int_{t_f}^{t_f} U^* dt = \frac{1}{\pi r^2} \int_{t_f}^{t_f} \frac{r^2}{4D(t_f - t)} \exp\left[-\frac{r^2}{4D(t_f - t)}\right] dt \quad (25)$$

(25)식에서 $x = \frac{r^2}{4D(t_f - t)}$ 로 치환하여 정리하면

$$\begin{aligned} \int_{t_f}^{t_f} U^* dt &= \frac{1}{4D\pi} \int_a^x \frac{e^{-x}}{x} dx \quad \left[a = \frac{r^2}{4D(t_f - t_f)} \right] \\ &= \frac{1}{4\pi} E_i[a] \end{aligned} \quad (26)$$

(26)식에서 $E_i[a]$ 는 exponential - interal function 이라 한다. 따라서 (23)식은

$$\begin{aligned} & 1/2 U(Q', t_f) - \frac{1}{2\pi} \int_r \frac{1}{r} \exp\left[-\frac{r^2}{4D(t_f - t_f)}\right] \frac{\partial r}{\partial n} \Big|_{t_f} d\Omega \\ & = \frac{1}{4\pi} \int_r E_i[a] q_r d\Omega + \\ & \quad \frac{1}{4D\pi(t_f - t_f)} \int_{\Omega} U_{t_0} \exp\left[-\frac{r^2}{4D(t_f - t_0)}\right] d\Omega \end{aligned} \quad (27)$$

(27)식으로 표현된 경계 적분 방정식을 이산화하여 연립 방정식으로 유도할 수 있다. Fig.3에 경계를 N 개의 element 로 이산화 시키고 기준이 되는 boundary element를 C_i 로 임의의 거리를 $r(Q, Q')$ 라 하자.

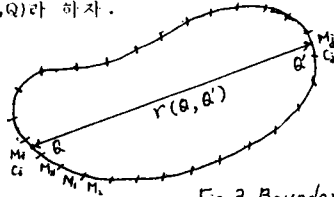


Fig. 3 Boundary element

이때 (27)식의 경계 적분 방정식은 (28)식으로 표시할 수 있다.

$$\begin{aligned} 1/2 U_i^j &= \frac{1}{2\pi} \sum_{j=1}^N \left\{ \int_{C_j} \frac{1}{r} \exp\left[-\frac{r^2}{4D(t_f - t_{f,j})}\right] \frac{\partial r}{\partial n} ds \right\} U_j^j \\ & + \frac{1}{4\pi} \sum_{j=1}^N \int_{C_j} E_i \left[\frac{r^2}{4D(t_f - t_{f,j})} \right] ds U_j^j \\ & + \frac{1}{4\pi D(t_f - t_{f,i})} \sum_{j=1}^N \int_{C_j} \left\{ \exp\left[-\frac{r^2}{4D(t_f - t_{f,j})}\right] \right\} d\Omega U_{f,j}^j \end{aligned} \quad (28)$$

(28)식의 계수항을 다음과 같이 치환하면

$$h_{ij} = \frac{1}{2\pi} \int_{C_j} \frac{1}{r} \exp\left[-\frac{r^2}{4D(t_f - t_{f,j})}\right] \frac{\partial r}{\partial n} ds \quad (29)$$

$$e_{ij} = \frac{1}{4\pi} \int_{C_j} E_i \left[\frac{r^2}{4D(t_f - t_{f,j})} \right] ds \quad (30)$$

$$b_j = \frac{1}{4\pi D(t_f - t_{f,i})} \int_{C_j} \exp\left[-\frac{r^2}{4D(t_f - t_{f,j})}\right] d\Omega \quad (31)$$

(29), (30), (31)을 이용하여 (28)식을 다시 쓰면

$$1/2 U_i^j = \sum_{j=1}^N h_{ij} U_j^j + \sum_{j=1}^N e_{ij} U_j^j + \sum_{j=1}^N b_j U_{f,j}^j \quad (32)$$

(32)식을 matrix형식으로 쓰면

$$1/2 U_i^j = H^j U_j^j + G^j U_{f,j}^j + B^j U_{f,i}^j \quad (33)$$

$H = 1/2 I - H^j$ 로 치환하면 (33)식은

$$H U_i^j = G^j U_j^j + B^j U_{f,i}^j \quad (34)$$

(34)식의 matrix의 계수값을 구하기 위해서는 (29), (30), (31)식의 적분을 analytical 하게 풀거나 gaussian quadrature를 이용하여 구하며 Time Marching II에서 자세히 설명하기로 한다.

(2) Time Marching II

Time Marching I에서 구한 식 (16) (21)까지 동일하므로 (27)식을 다시 보면

$$U(P', t_f) + D \int_{t_0}^{t_f} \int_{\Omega} U q^* d\Omega dt = D \int_{t_0}^{t_f} \int_{\Omega} q U^* d\Omega dt + \int_{\Omega} U U^* \Big|_{t=t_0} d\Omega \quad (35)$$

여기서 t_0 는 초기시간 이고 t_f 는 최종적으로 농도값을 구하려는 시간이다 그리고 경계 적분 방정식은 Time Marching I에서는 구한 것과 동일한 방법으로 구한다

$$\begin{aligned} & 1/2 U(Q', t_f) + D \int_{t_0}^{t_f} \int_{\Omega} U(Q, t) q^*(Q, Q', t_f, t) d\Omega dt \\ & = D \int_{t_0}^{t_f} \int_{\Omega} q(Q, t) U^*(Q, Q', t_f, t) d\Omega dt + \\ & \quad \int_{\Omega} U(P, t_0) U^*(Q, Q', t_f, t_0) d\Omega \end{aligned} \quad (36)$$

시간 구간을 t_0 에서 t_f 까지를 F 개로 이산화시키고 각 구간에서 u 와 q 는 일정하다 가정하면

$$\begin{aligned} & 1/2 U(Q', t_f) + D \sum_{f=1}^F \int_{t_{f-1}}^{t_f} \int_{\Omega} U(Q, t) q^*(Q, Q', t_f, t) d\Omega dt \\ & = D \sum_{f=1}^F \int_{t_{f-1}}^{t_f} \int_{\Omega} q(Q, t) U^*(Q, Q', t_f, t) d\Omega dt + \\ & \quad \int_{\Omega} U(P, t_0) U^*(Q, Q', t_f, t_0) d\Omega \end{aligned} \quad (37)$$

시간 구간 $t_{f-1} < t < t_f$ 에 대한 적분을 구하면

$$\begin{aligned} & 1/2 U_f(Q', t_f) + \frac{1}{2\pi} \sum_{f=1}^F \int_r \frac{1}{r} \left\{ \exp\left[-\frac{r^2}{4D(t_f - t_{f-1})}\right] \right. \\ & \quad \left. \exp\left[-\frac{r^2}{4D(t_f - t_{f,i})}\right] \right\} \frac{\partial r}{\partial n} U_f d\Omega \\ & = \frac{1}{4\pi} \sum_{f=1}^F \int_r \left\{ E_i(a_f) - E_i(a_{f,i}) \right\} q_f d\Omega + \\ & \quad \frac{1}{4\pi D(t_f - t_0)} \int_{\Omega} U_0 \exp\left[-\frac{r^2}{4D(t_f - t_0)}\right] d\Omega \end{aligned} \quad (38)$$

이식에서

$$a_f = \frac{r^2}{4D(t_f - t_e)}, \quad a_{f-1} = \frac{r^2}{4D(t_f - t_{f-1})}$$

또한 경계를 N개의 element로 이산화시키며 각 element에서 U_f 와 q_f 값이 일정하다면

$$\begin{aligned} 1/2 U_f^j = & -\frac{1}{2\pi} \sum_{f=1}^N \sum_{j=1}^N \left\{ \int_{\Omega_f} \frac{1}{\exp\left(-\frac{r^2}{4D(t_f - t_e)}\right)} \left[\frac{\partial r}{\partial n} \right] ds \right\} U_f^j \\ & + \frac{1}{4\pi} \sum_{f=1}^N \sum_{j=1}^N \left\{ \int_{\Omega_f} \left[E_i(a_f) - E_i(a_{f-1}) \right] ds \right\} q_f^j \\ & + \frac{1}{4\pi D(t_f - t_e)} \int_{\Omega} \exp\left(-\frac{r^2}{4D(t_f - t_e)}\right) U_e d\Omega \end{aligned} \quad (39)$$

(39)식의 계수항을 다음과 같이 치환하면

$$h_{ij} = -\frac{1}{2\pi} \int_{\Omega_f} \frac{1}{r} \left[\exp\left(-\frac{r^2}{4D(t_f - t_e)}\right) \right] \frac{\partial r}{\partial n} ds \quad (40)$$

$$q_{ij}^f = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega_f} \left[E_i(a_f) - E_i(a_{f-1}) \right] ds \quad (41)$$

그러므로 (39)식은

$$1/2 U_f^j = \sum_{j=1}^N \sum_{f=1}^N (h_{ij} U_f^j + q_{ij}^f q_f^j) + \frac{r^2}{4\pi D(t_f - t_e)} \int_{\Omega} \exp\left[-\frac{r^2}{4D(t_f - t_e)}\right] U_e d\Omega \quad (42)$$

그런데 predeposition 과정의 경우에 초기의 내점값 U_e 는 영 (zero)가 된다 따라서 (42)식은

$$1/2 U_f^j = \sum_{j=1}^N \sum_{f=1}^N (h_{ij} U_f^j + q_{ij}^f q_f^j) \quad (43)$$

(43)식을 matrix 형식으로 쓰면

$$1/2 \bar{U}_f = H_f \bar{U}_f + G_f \bar{q}_f \quad (44)$$

$$H_f = 1/2 I - H_f \quad \text{로 치환하면 (44)식은} \quad (45)$$

$$H_f \bar{U}_f = G_f \bar{q}_f$$

이상으로 확산 방정식을 (43)식으로 표현되는 N원 연립 방정식으로 이산화 하였다. (45)식의 계수 matrix H_f 와 G_f 의 각 성분은 다음과 같이 구할 수 있다.

(43)식에서 $i=j$ 이고 $f=F, f \neq F$ 일 경우 h_{ij} 와 q_{ij}^f 는 analytical하게 구한다 $i \neq j$ 이고 $f=F, f \neq F$ 일 경우 다음식으로 표현되는 Gaussian quadrature를 이용하여 구한다

$$\int_{\Omega} f(\xi) d\xi = \sum_{k=1}^3 W_k f(W_k) \quad (46)$$

이상에서 계수를 구하고 이를 이용하여 미지의 경계값 U_f 와 q_f 를 구할 수 있다. 영역의 내점에 대한 이산화는 순서있게 구할 수 있다. 즉 (35), (36)식을 비교하면 내점의 값은 경계값이 2배가 됨을 쉽게 알 수 있다. 그러므로 영역의 내점의 값은 경계 적분 방정식에서 얻은 경계치 값을 다음식에 대입하여 얻을 수 있다.

$$U_f^j = \sum_{j=1}^N \sum_{f=1}^N (h_{ij} U_f^j + q_{ij}^f q_f^j) \quad (47)$$

내점의 경우는 $i=j$ 이므로 $H_f = 1/2 I - H_f$ 에서 unit matrix는 존재하지 않는다. 따라서

$$h_{ij}^f = -h_{ij} \quad \text{가 되면 (47) 식을 다시 쓰면} \quad (48)$$

$$U_f^j = \sum_{j=1}^N \sum_{f=1}^N (-h_{ij} U_f^j + q_{ij}^f q_f^j)$$

이 식에서 구한 해는 predeposition 과정에서 영역내의 불순물의 농도값이 된다.

drive-in 과정에서 불순물의 농도를 구해보자.

(42) 식을 다시 쓰면

$$\frac{1}{2} U_f^j = \sum_{j=1}^N \sum_{f=1}^N (h_{ij} U_f^j + q_{ij}^f q_f^j) + \frac{1}{4\pi D(t_f - t_e)} \int_{\Omega} \exp\left[-\frac{r^2}{4D(t_f - t_e)}\right] U_e d\Omega \quad (49)$$

(49) 식은 다음과 같이 표현된다.

$$1/2 U_f^j = \sum_{j=1}^N \sum_{f=1}^N (h_{ij} U_f^j + q_{ij}^f q_f^j) + \int_{\Omega} U_e U^* d\Omega \quad (50)$$

(50) 식에서 우변의 두번째 항을 모변 적분을 해야 하는데 이것을 다시 경계 적분식으로 전환시킬 수 있다.

즉 Green 정리를 쓰면

$$\int_{\Omega} U_e U^* d\Omega = \int_{\Omega} U_e \nabla^2 P d\Omega = \int_{\Gamma} \left(U_e \frac{\partial P}{\partial n} - P \frac{\partial U_e}{\partial n} \right) d\Gamma \quad (51)$$

여기서 $\nabla^2 P = U^*$ (52)

$$P = \int \frac{1}{r} \left(\int r U^* dr \right) dr \quad (53)$$

첫번째 적분식을 풀면

$$\frac{1}{4\pi D\alpha} \exp\left[-\frac{r^2}{4D\alpha}\right] dr \quad (54)$$

$$\alpha = t_f - t_e$$

$$\int \frac{r}{4\pi D\alpha} \exp\left[-\frac{r^2}{4D\alpha}\right] dr = -\frac{1}{2\pi} \exp\left[-\frac{r^2}{4D\alpha}\right] \quad (55)$$

따라서

$$P = -\int \frac{1}{2\pi r} \exp\left[-\frac{r^2}{4D\alpha}\right] dr = -\frac{1}{4\pi} E_i\left[\frac{r^2}{4D\alpha}\right] \quad (56)$$

(51) 식은

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma} \left[U_e \frac{\partial P}{\partial n} - P \frac{\partial U_e}{\partial n} \right] d\Gamma \\ = \frac{1}{2\pi} \int_{\Gamma} \frac{1}{r} \exp\left[-\frac{r^2}{4D\alpha}\right] \frac{\partial r}{\partial n} U_e d\Gamma - \frac{1}{4\pi} \int_{\Gamma} E_i\left[\frac{r^2}{4D\alpha}\right] q_e d\Gamma \end{aligned} \quad (57)$$

(57)식을 경계 적분 방정식으로 쓰고 이산화시키면

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} U_e(Q) + \frac{1}{2\pi} \sum_{j=1}^N \left[\int_{\Omega_j} \frac{1}{r} \exp\left[-\frac{r^2}{4D\alpha}\right] \frac{\partial r}{\partial n} ds \right] U_f^j \\ - \frac{1}{4\pi} \sum_{j=1}^N \left[\int_{\Omega_j} E_i\left(\frac{r^2}{4D\alpha}\right) ds \right] q_f^j \end{aligned} \quad (58)$$

(58)식의 계수항을 치환하면

$$h_{ij} = \frac{1}{2\pi} \int_{\Omega_j} \frac{1}{r} \exp\left[-\frac{r^2}{4D\alpha}\right] \frac{\partial r}{\partial n} ds \quad (59)$$

$$q_{ij}^f = -\frac{1}{4\pi} \int_{\Omega_j} E_i\left[\frac{r^2}{4D\alpha}\right] ds \quad (60)$$

따라서

$$\int_{\Omega} U_e U^* d\Omega = \sum_{j=1}^N (h_{ij} U_f^j + q_{ij}^f q_f^j) + 1/2 U_e(Q) \quad (61)$$

Matrix 형태로 고치면

$$1/2 \bar{U}_e + H_e \bar{U}_e + G_e \bar{q}_e \quad (62)$$

$$H_e = 1/2 I + H_e \quad \text{로 치환하면} \quad (63)$$

$\int_{\Omega} U_e U^* d\Omega = H_e \bar{U}_e + G_e \bar{q}_e$
Matrix 계수는 (59), (60) 식에서 $i=j$ 일때 analytical하게 풀고 $i \neq j$ 일때는 앞식에서 주어진 Gaussian quadrature를 이용하여 구할 수 있다.

(50)식을 matrix 형식으로 구하고 (63) 식을 대입하면

$$1/2 \bar{U}_e(Q, t_e) = H_e \bar{U}_e + H_e \bar{U}_e + G_e \bar{q}_e + G_e \bar{q}_e \quad (64)$$

$$H_e = 1/2 I - H_e \quad \text{로 치환하면 (64) 식은} \quad (65)$$

$$H_e \bar{U}_e = G_e \bar{q}_e + H_e \bar{U}_e + G_e \bar{q}_e$$

(65) 식에서 H_e 와 G_e 는 predeposition 과정에서 구한 것과 동일하고 U_e 와 q_e 도 predeposition 과정에서 구한 값이 된다.

이 값은 drive-in 과정의 초기값이 된다. drive-in 과정에서 내점값은 경계값의 2배이고 $h_{ij} = -h_{ij}$, $q_{ij} = q_{ij}$ 가 된다.

따라서 (65) 식은

$$U_f^j = \sum_{j=1}^N \sum_{f=1}^N (-h_{ij} U_f^j + q_{ij}^f q_f^j) + \sum_{j=1}^N (h_{ij} U_f^j + q_{ij}^f q_f^j) \quad (66)$$

이 식에서 구한 해는 drive-in 과정에서 영역내의 불순물의 농도값이 된다. 이상의 이산화 과정을 통한 실리콘의 불순물의 농도값은 computer programing에 의해 구할 수 있다.

2. 결과

Fig.1의 경계 조건과 (66)식으로 이산화 된 확산 방정식을 이용하여 실리콘내에서 불순물의 분포를 구할 수 있다.
 Fig.5.a 는 논문에서 제시한 Simulation 방법을 통하여 계산된 Thermal Oxidation 이 고려된 drive-in 과정동안의 불순물 재분포와 Thermal oxidation 이 고려되지 않은 경우 [11] 단순한 gauss 분포를 갖는 경우를 비교하여 나타내고 있으며 b 는 시간의 변화에 따른 불순물의 재분포 나타낸다.

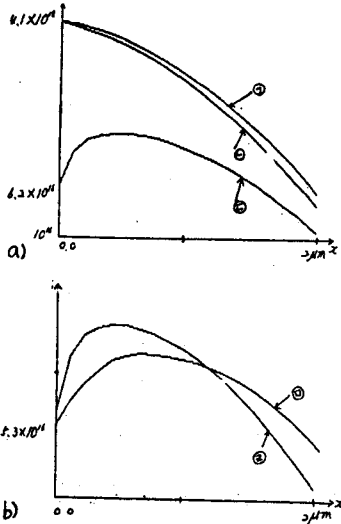


Fig.5 Simulation 결과와 analytical 결과의 비교
 > gauss 분포
 < oxidation을 고려하지 않은 불순물 분포
 < oxidation을 고려한 불순물 분포
 < 1200 sec 경과후 결과
 < 2400 sec 경과후 결과

Fig.6은 segregation계수에 따른 불순물 분포와 reference(7)과의 비교를 나타 내었다.

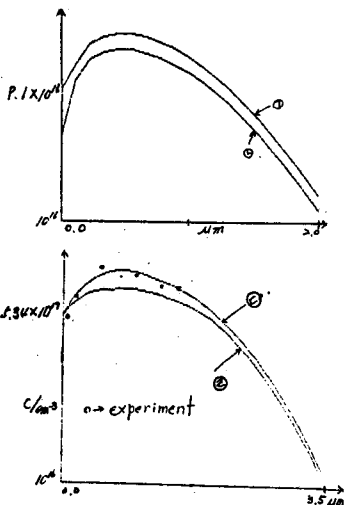


Fig.6 Ssimulation 결과와 analytical 결과의 비교
 > k=3 일때 불순물 분포
 < k=9 일때 불순물 분포
 < reference(7)의 불순물 분포
 < reference(7)과 같은 조건상의 불순물 분포

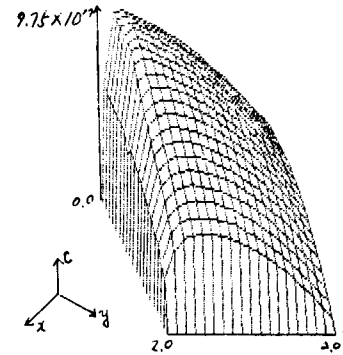


Fig.7 3차원 Simulation 결과
 IV 결론

BEM을 이용한 computer simulation을 통하여 실리콘내에서 불순물 분포를 구하였다. gauss 분포와는 많은 값 차이를 보이지만 [7]의 analytic 한 결과에 비해 실험치가 아래에 위치함을 볼 때 numerical 한 결과가 상당히 근접함을 알 수 있다
 이 과정에서 BEM이 기존의 수치적인 방법보다 요소 분할이 간편 하고 결점의 수가 현저히 감소하고 경계에서의 값으로 내점의 값을 쉽게 구할 수 있음을 확인하였다.
 확산 계수가 온도와 농도의 함수가 되는 비선형 확산 방정식도 본 논문에서 적용한 경계 요소법을 보완해 적용한다면 구할 수 있으리라고 생각한다.

참 고 문 헌

1. A. Buonomo and C. Di Bello, "Two-dimensional numerical analysis of impurity atom diffusion in semiconductor," IEEE Trans. Electron Devices, vol. ED-30, pp.857-860, July 1986
2. A. Buonomo and C. Di Bello, "Nonlinear two-dimensional impurity in semiconductor: A Quasi-linear numerical analysis," IEEE Electron Devices, Vol. ED-31, pp.1708-1713, Dec. 1984
3. A. Seidl, "A multigrad method for solution of the diffusion in VLSI process modeling," IEEE Trans. Electron Devices, Vol. ED-20, pp.999-1003, Aug. 1983
4. C. A. Brebbia, J. C. F. Telles and L. C. Wrobel, "Boundary element techniques theory and Application in engineering," Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York Tokyo 1984
5. C. A. Brebbia, S. Walker "Boundary element technics in engineering," Newnes-Butterworth, London, 1980
6. S. K. Ghadhi, "VLSI fabrication principle," New York, 1980
7. J. S. T. Huang and L. c. Welliver, "On the redistribution of boron in the diffused layer during thermal oxidation," J. Electrochem. Soc, Vol. 117, pp.1577-1580, 1970
8. D. Chin, Soo-Young Oh and Shin-Ming Hu, R. W. Dutton and J. L. Moll "Two-dimensional oxidation," IEEE Trans. Electron Devices, Vol. ED-30, NO. 7, July 1983
9. Hee-Gook Lee, R. W. Dutton and D. A. Antoniadis "On redistribution of Boron during thermal oxidation of silicon," J. Electrochem. Soc: Solid- state science and technology Nov.1979
10. J. W. Colby and L. E. Katz " Boron segregation at Si-SiO2 interface as a function for temperature and orientation," J. Electrochem. Soc, Vol.123 NO.3 pp.409-412 March 1976
11. 김 산규, 황 호경 "경계 요소법을 이용한 실리콘내에서 2차원 불순물 분포 산출," 전기 전자 학회 학술 대회 논문집 Vol 1. No. 1, 7.1987