

論文99-36D-7-2

국부 셀 격자 결함 모델을 사용한 극 저 에너지 이온 주입에 관한 연구

(A Study on the Ultra-Low Energy Ion Implantation using Local Cell Damage Accumulation Model)

權五勤*, 姜正遠*, 黃好正*

(Oh-Keun Kwon, Jeong-Won Kang, and Ho-Jung Hwan)

요 약

본 논문은 극 저 에너지 이온 주입의 원자단위 연구를 위하여 국부 셀 격자결함 축적 모델(local cell damage accumulation model)을 제안하고, 분자 역학 방법(molecular dynamics method)을 사용한 이온 주입 시뮬레이션 결과를 보여주고 있다. 국부 격자결함 확률 축적 함수는 각 단위 셀에 축적된 에너지, 이온 빔 전류, 기판 물질, 주입 이온 과 이온 발생 순서 등으로 구성되어 있다. 시뮬레이션 결과는 SIMS 측정치 및 다른 분자 역학 시뮬레이션과 잘 일치한다. 격자결함을 고려하지 않는 MDRANGE는 격자 결함으로 인한 채널링 억제 효과가 나타나지 않기 때문에 불순물 분포의 꼬리 부분에서 많은 차이를 보였다. 또한 국부 격자결함 축적 모델을 사용한 경우와 이를 고려하지 않은 경우의 불순물과 격자결함에 관한 2차원 분포를 계산하여 국부적으로 축적된 격자결함이 이온의 진행에 큰 영향을 미치는 것으로 나타났다.

Abstract

We have investigated effects of local damage accumulation for ultra-low energy As and B ion implant using highly efficient molecular dynamics (MD) scheme. We simulated ion implantation by MD simulation using recoil ion approximation (RIA) method and local cell damage accumulation (LCDA) model proposed in the paper. Local damage accumulation probability function consisted of deposited energy in a unit cell, implant dose rate, target material, projectile atom, and recoil event number. The simulated results were good agreement with the experimental and other simulated results. The MDRANGE results without damage accumulation were different from SIMS data in the tail region. We also simulated 2 dimensional dopant and damage profiles using the local damage accumulation model and recoil ion approximation method.

1. 서 론

이온 주입 공정은 반도체 집적회로 제조 기술에서 중요한 공정 기술이다. 반도체 소자의 크기가 마이크

로 미터 이하로 감소함에 따라서, 극 저 에너지 이온 주입 공정과 열처리 공정의 감소 등이 요구되고 있다^[1]. 이온 주입으로 발생된 격자결함들은 후속 공정인 어닐링 공정에서 TED (transient enhanced diffusion)와 같은 확산 현상을 일으키게 된다^[1,2]. 극 저 에너지 이온 주입과 초 미세 접합에 관한 많은 연구들이 원자단위 계산과 시뮬레이션을 통하여 수행되어지고 있으며, 초 미세 접합 형성을 위해서는 컴퓨터 시뮬레이션을 통하여 이온 주입수 최종 불순물 분

* 正會員, 中央大學校 電子工學科

(Department of Electronic Engineering, Chung-Ang University)

接受日:1999年3月9日, 수정완료일:1999年6月18日

포와 격자결합 분포가 정확하게 계산되어야 한다.

이온 주입된 불순물과 격자결합 분포를 계산하기 위하여 BCA(binary collision approximation) 방법과 MD(molecular dynamics) 방법이 사용되어져 왔다^[3,4,5]. BCA 방법이 이온과 기판물질 사이의 이원 충돌(binary collision)을 가정하고 있기 때문에, 다원자간 상호작용이 반드시 고려되어야 하는 극 저 에너지 이온 주입에서 이온이 채널링되는 경우를 계산하는데 문제점 가지고 있다.^[6] 최근 극 저 에너지 이온 주입 공정에 관한 연구에 MD 방법이 많이 이용되어지고 있다. 특별히 더 작은 크기의 반도체 소자를 제조하기 위하여, 많은 이론적인 연구들이 MD 시뮬레이션을 사용하고 있다. MD 방법이 BCA 방법 보다 이론 및 계산의 정확성이 뛰어나도 불구하고, 기판 물질내의 연속적인 충돌을 계산하는 전통적인 MD 시뮬레이션은 컴퓨터 계산량이 많기 때문에, 실질적으로 이용할 수 있는 불순물의 분포와 격자결합을 예측하는데 많은 어려움을 가지고 있다. 이러한 이유로 컴퓨터 계산량을 줄이는 방법이 연구되어 MDRANGE^[7]에서 사용되는 RIA(recoil ion approximation) 방법과 REED-MD(rare event enhance domain following molecular dynamics) 방법^[6]이 제안되었다. 그러나 MDRANGE는 점결합 분포와 격자결합이 고려된 이온 주입으로 인한 불순물의 분포를 예측할 수 없다는 단점을 가지고 있다. REED-MD의 격자결합은 단순한 Kinchin-Pease 모델(simple Kinchin-Pease model)을 사용하고 있으며, 이 모델을 사용하여 단위 부피당 Frenkel 쌍은 축적된 에너지(deposited energy)와 격자점의 원자가 격자점에서 떨어져 나올 수 있는 문턱 에너지와 관계되어 있다.^[8] 그러나 극 저 에너지 이온 주입시에서도 발생된 격자결합들은 주입된 이온을 중심으로 비정질화된 영역(amorphous-like pocket) 또는 국부용해 영역(local melting region)을 형성한다.^[2,5] 이러한 결과 손상 영역은 단순한 Kinchin-Pease 모델을 사용하여 설명하기가 어렵다. 또한 실리콘 내부에서 일어난 연속적인 충돌에 의해서 발생된 틈새들의 평균 변위(interstitial mean displacement)는 3Å 정도이다.^[5] 대부분의 격자결합들은 국부적인 비정질 영역(local amorphous region) 또는 국부적인 용해 영역(local melting region)과 비슷하게 되어 격자결합들이 복잡한 형태(complex-

form)들을 이루고 있기 때문에, 국부적인 원자단위의 주위 환경은 MD 계산에 큰 영향을 미치게 된다. MD 방법을 적용하여 이온 주입 분포를 예측하기 위해서는 격자결합 축적에 관한 새로운 접근이 필요하다. 그러므로 본 연구에서는 컴퓨터 계산효과를 고려하고 이전의 MD 이온주입 시뮬레이션 결과들을 사용하여 해석적인 국부 셀 격자결합 축적 모델을 제안하고, 이온 주입 분포를 계산하기 위하여 효과적인 분자동역학 시뮬레이터에 적용하여 계산된 결과를 SIMS 측정 결과 및 다른 시뮬레이션 결과들과 비교 분석하였다.

II. 효과적인 분자 역학 방법을 위한 국부 셀 격자결합 축적 모델

본 연구에서는 분자 역학 방법을 사용하여 극 저 에너지 이온 주입을 시뮬레이션 한다. 실리콘사이의 상호작용을 계산하기 위하여 SW(Stilliner-Weber) 전위식^[9]의 두 원자간 상호작용의 반발항을 ZBL(Ziegler-Biersack-Littmark) 전위식^[10]으로 연결한 Gartner등의 데이터^[11]를 사용한다. 실리콘과 이온사이의 ZBL 반발 전위식을 사용한다. 전자 저지력은 Cai 등의 파라미터^[12]를 사용하여 계산되고, 이온의 전자들이 실리콘에 전달하는 운동량으로 인한 이온의 운동에너지의 감소는 Firsov 모델^[13]을 사용하여 계산한다.

시뮬레이션 영역(domain)은 3×3×3 단위 셀로 구성되고, 시간에 따른 속도 및 위치 계산은 뉴턴 역학(Newtonian dynamics)을 적용하였다. 시뮬레이션 초기 실리콘 기판은 300K에 해당되는 적당한 속도를 가지며, 각 격자점의 실리콘 원자들은 Debye 모델을 사용하여 변위된 위치(displaced position)에 있게 된다. 초기 속도 분포는 맥스웰-가우스 분포를 가정하였다. 모든 시뮬레이션에서 실리콘 표면의 산화층은 없는 것으로 가정되었다. 분자 역학 방법이 적용되는 영역(domain)은 이온 진행 방향에 따라서 계속해서 생성되어지고 이온 진행 반대 방향의 영역은 계산영역에서 제거된다. 실리콘 내부에 축적된 격자결합들을 고려한 이온 주입을 위해서는 현상학적인 특징을 볼 수 있도록 다음과 같은 모델을 제안하였다.

현재의 주입된 이온이 이전의 주입된 이온의 연속적

인 충돌로 발생한 격자결함을 고려하기 위해서, 국부 셀 격자결함 축적 함수(local cell damage accumulation function)를 제안한다. 분자 역학 방법이 적용되는 모든 셀은 메모리가 할당되어지고, 각 셀의 격자결함 확률은 매 이온 주입 발생동안에 계산되어 저장된다. 셀의 격자결함 확률은 이온 진행 방향에 새로운 분자 역학 계산영역을 생성할 때 Debye 변위에 추가되어 각 격자점의 변위에 영향을 미치게 된다. 높은 격자결함 확률을 가질수록, 평균 변위는 커지게 된다. 축적된 격자결함 확률은 단위 셀에 축적된 에너지, 이온 빔 전류, 기판 물질, 이온 종류, 이온 주입 발생 순서 등으로 구성된 함수로 다음과 같이 된다.

$$f_D(E_{ION}, R_D, M_1, M_2, R_X, n_{recoil}) \quad (1)$$

여기서 E_{ION} 은 셀에 축적된 에너지(deposited energy in a unit cell)이고, R_D 는 이온 빔 전류(dose rate), M_1 은 기판 물질의 원자량, M_2 는 주입되는 이온의 원자량이고, R_X 은 이완 및 재결합 효과(relaxation & recombination effects)를 고려한 파라미터이고, n_{recoil} 은 이온 주입 순서이다. 격자결함 확률 f_D 는 이온 주입이 진행될수록 증가하고, 실리콘 내부에서의 연속적인 충돌에 의해서 발생한 격자결함들은 이웃하는 원자들과 상호작용하고 이완되고 재결합하기 때문에 이완 및 재결합 변수에 의해서 감소하게 된다. 본 연구에서는 이온 빔 전류의 효과를 무시한다. 그러므로 f_D 는 현재의 주입된 이온에 의해서 계산된 값과 이완과 재결합을 고려하여 이전에 계산된 값을 합하게 된다. 이온 주입 에너지가 증가할수록 격자결함들이 급격하게 증가하기 때문에 본 연구에서 f_D 가 셀의 축적된 에너지에 지수 함수적으로 비례하는 것으로 가정하였다. 그러나 이러한 가정은 FCMD(full classical molecular dynamics) 연구를 통하여 정확하게 검증되어야하고 향후 수정 및 향상이 필요한 부분이다. 또한 무거운 이온 주입일 경우 이온을 중심으로 많은 격자결함이 발생되고, 가벼운 이온 주입일 경우 이온을 중심으로 격자결함이 적게 발생된다. 그러나 주입된 이온을 중심으로 발생한 격자결함생성은 그 반경이 이온의 질량에 선형으로 비례하지 않는다. 그러므로 본 연구에서는 잠정적으로 f_D 가 $(M_2/M_1)^{1/2}$ 에 선형으로 비례하는 것으로 가정하였다. 따라서 식(1)은 다음과 같이 된다.

$$f_1(E_{ION}, M_1, M_2) = a \exp(\beta \cdot |E_{ION}|) \sqrt{\frac{M_2}{M_1}} \quad (2)$$

여기서 f_1 은 이온이 국부셀을 통과한 직후의 격자결함 확률이다. 에너지 단위는 keV이고 a 는 격자결함을 가진 셀 안에 원자들의 평균 변위를 맞추기 위한 변수이고 β 는 격자결함을 가진 셀 내에 축적된 평균 에너지(mean deposited energy)를 맞추기 위한 변수이다. a 와 β 는 시뮬레이션 결과와 1차원적인 SIMS 실험치와 일치되도록 조정되어졌다. 붕소의 경우, a 는 0.0325 \AA^{-1} 이고 β 는 0.42 keV^{-1} . 비소의 경우, a 는 0.025 \AA^{-1} 이고 β 는 0.25 keV^{-1} .

격자결함을 가진 셀 내부의 원자들의 이완 및 재결합 비율 R_X 는 국부적인 환경(local environment)에서 발생하는 이온 발생(history of recoil event) 및 축적 에너지(deposited energy)와 밀접하게 관계되어 있다. 이온이 국부 셀 영역을 통과하는 동안 연속적인 충돌에 의해서 격자결함이 발생된다. 발생한 격자결함들은 이웃하는 원자들과의 상호작용을 통하여 이완되고 재결합된다. 그러나 만약 계속해서 발생하는 이온이 그 셀 안에 다시 들어온다면, 격자결함은 더욱 증가할 것이다. 만약 그 셀 안에 다음 이온이 들어오는 주기가 길어진다면, 그 기간동안 격자결함들은 충분히 이완되고 재결합할 것이다. 그러므로 이완 및 재결합 비율 R_X 는 다음과 같이 축적된 에너지와 그 셀을 통과하는 이온의 주기, 곧 주입 이온 발생 사건(history of recoil event)과 밀접하게 관계되어 있다.

$$R_X = f_1(E_{ION}, M_1, M_2) \times \frac{\text{atan}(0.1 * (N_{recl} - N_{recl2}))}{1.5708} \quad (3)$$

여기서 N_{recl} 은 어떤 셀을 통과한 과거의 이온 발생 번호이고 N_{recl2} 는 그 셀 안으로 현재 들어온 이온의 발생 번호이다. 어떤 한 셀을 통과하는 이온 주기가 짧아지면, 이완 및 재결합 비율 R_X 는 작아지게 된다.

최종적으로 이전 이온이 국부셀을 통과한 직후의 격자결함 확률인 식(1)의 값에서 현재 이온이 그 국부셀에 들어오는 시간 간격에서 일어난 이완 및 재결합 비율인 식(2)의 값을 뺀 결과가 현재 이온이 들어가는 국부셀의 격자결함 축적이 되고 식은 다음과 같이 된다.

$$f_D = \alpha \exp(\beta \cdot |E_{ion}|) \sqrt{\frac{M_2}{M_1}} \times \left(1 - \frac{\text{atan}(0.1 * (N_{rec1} - N_{rec2}))}{1.5708}\right) \quad (4)$$

이온 진행 방향에 따라 발생되어지는 모든 셀은 Debye 모델을 사용한 변위 뿐만 아니라 국부 격자결함 측정 확률 f_D 에 의해서 변위가 추가되게 된다.

III. 시뮬레이션 결과 및 고찰

모든 시뮬레이션은 300K에서 Si{100} 기판에 대하여 수행된다. 도즈 $10^{12}/\text{cm}^2$ 2 keV 비소, 도즈 $10^{12}/\text{cm}^2$ 500 eV 붕소, 도즈 $10^{15}/\text{cm}^2$ 500 eV 붕소 및 도즈 $3 \times 10^{15}/\text{cm}^2$ 1 keV 붕소 이온 주입 불순물 분포를 계산하였다.

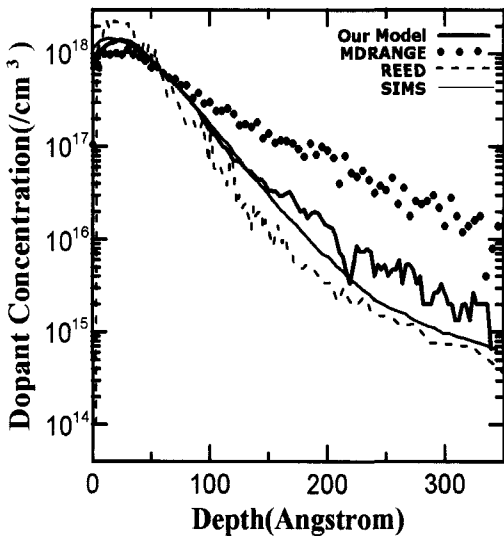


그림 1. 도즈 $10^{12}/\text{cm}^2$ 에너지 500 eV 붕소 이온 주입인 경우의 국부 셀 격자결함 측정 모델, MDRANGE, REED-MD 및 SIMS 측정 분포 비교

Fig. 1. Local cell damage accumulation model, MDRANGE, REED-MD and experimental dopant profiles due to 500 eV B into Si[100].

본 연구에서 수행된 시뮬레이션을 위해서는 보통 5640 kB 메모리가 요구되었다. VC++ 컴파일러를 가진 WinNT OS에서 실행되는 Alpha 21164 600 MHz PC에서 2 keV 기울기 각도 7° 비소 10000개 이온 주입인 경우 CPU 사용시간은 7분 정도이며,

500 eV 붕소 10000개 이온 주입인 경우 CPU 사용시간은 6분 정도이다. 이와 비교하여 REED-MD의 경우 100개 이온마다 splitting depth를 가지도록 하여 500 eV 붕소 1,000개 이온 주입인 경우 Pentium Pro-200 Mhz에서 CPU 시간은 17,447.47초가 걸린다.^[6] CPU 속도를 고려하더라도 본 연구에서 사용된 시뮬레이터는 REED-MD보다 계산 시간에서 장점을 가지는 것을 알 수 있다.

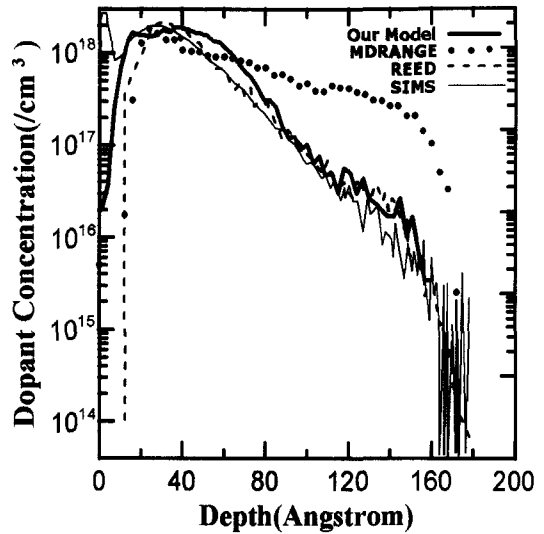


그림 2. 도즈 $10^{12}/\text{cm}^2$ 에너지 500 eV 경사도 7° 비소 이온 주입인 경우의 국부 셀 격자결함 측정 모델, MDRANGE, REED-MD 및 SIMS 측정 분포 비교

Fig. 2. Local cell damage accumulation model, MDRANGE, REED-MD and experimental dopant profiles due to 2 keV tilt 7° As into Si[100].

그림 1은 500 eV 붕소 이온 주입인 경우의 1차원적인 농도분포이고, 그림 2는 2 keV tilt 7° 비소 이온 주입인 경우의 1차원적인 농도분포이다. 각각은 SIMS 데이터^[6], MDRANGE 및 REED-MD^[6] 결과와 비교하였다. 모든 경우에 제안된 모델은 실험치와 일치한다. 그러나 격자결함을 고려하지 않은 MDRANGE 결과들은 불순물 분포의 꼬리 부분에서 많은 차이를 보이고 있다. 이는 격자결함으로 인한 채널링 억제(dechanneling) 효과가 고려되지 않았기 때문에, 1차원적인 불순물 분포의 꼬리 부분은 SIMS 및 본 모델을 사용한 결과의 꼬리부분보다 큰 값을 가진다. 그림 3은 도즈 $10^{15}/\text{cm}^2$ 에너지 500 eV 붕소

및 도즈 $3 \times 10^{15}/\text{cm}^2$ 에너지 1 keV 붕소의 결과를 격자 손상을 고려하지 않은 MDRANGE 결과와 LCMD 모델을 적용한 MDRANGE 결과의 1차원적인 농도 분포를 보여주고 있다.

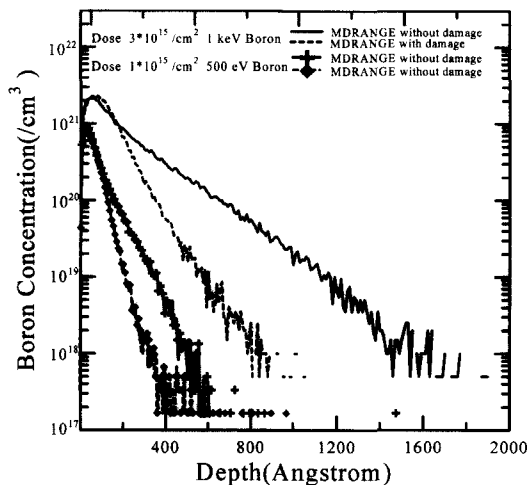


그림 3. 도즈 $10^{15}/\text{cm}^2$ 에너지 500 eV 붕소 이온 주입과 도즈 $3 \times 10^{15}/\text{cm}^2$ 에너지 1 keV 붕소 이온 주입인 경우의 격자 손상을 고려하지 않은 MDRANGE를 수행한 경우와 본 논문에서 제안한 격자 손상 모델을 적용한 MDRANGE의 결과 비교

Fig. 3. Comparison results of MDRANGE without damage with that of MDRANGE with local cell damage accumulation model.

그림 3의 결과도 그림 1과 그림 2의 결과와 같이 격자 결함을 고려하지 않은 경우에는 채널링이 많이 발생하여 농도 분포의 피크치를 지난 꼬리 부분에서 차이를 보이고있다. 그림 4는 2 keV tilt 7° 비소의 경우 2차원적인 불순물 분포를 보여주고 있다. 그림 4(a)는 국부 격자결함 추적 모델을 사용한 MDRANGE 결과이고, 그림 4(b)는 격자결함을 고려하지 않은 MDRANGE 결과이다. 제안된 모델에서, 추적된 격자결함으로 인하여 $\langle 100 \rangle$ 방향 채널링 경우들이 크게 감소되었다. 국부적인 격자결함을 고려한 MDRANGE 결과에서 $\langle 100 \rangle$ 방향 채널링은 격자결함을 고려하지 않은 MDRANGE 결과보다 더 적게 나타났다. 그러나 $\langle 110 \rangle$ 방향 채널링은 제안된 모델을 사용한 결과에서 MDRANGE보다 약간 더 많이 발생되었다. 격자결함들과의 충돌로 인하여 이온들이 측면으로 많이 산란되었기 때문이다. 그러므로 제안된

모델을 사용한 MDRANGE 결과의 측면 분포는 격자 결함을 고려하지 않은 MDRANGE의 측면 분포보다 약간 더 많이 퍼져있다.

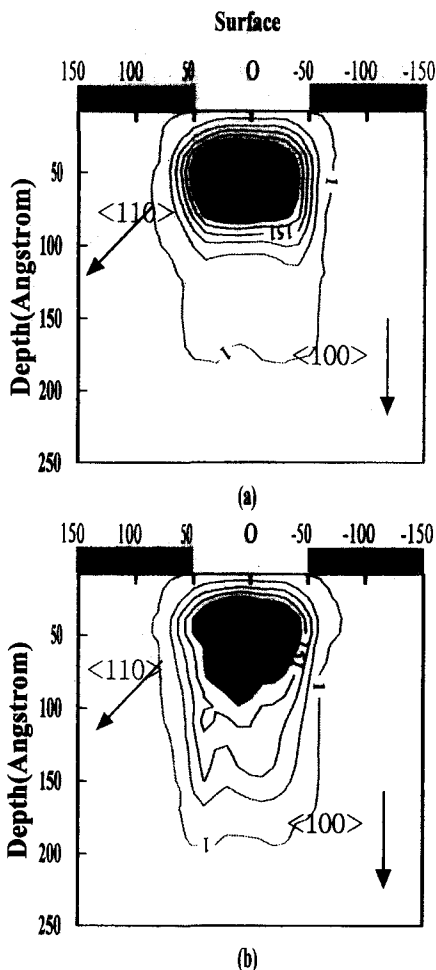


그림 4. Si[100] 실리콘 기판에 에너지 2 keV 경사도 7° 비소 이온 주입인 경우의 계산된 불순물의 분포. (a) 국부 셀 격자결함 추적 모델을 사용한 경우의 2차원적인 불순물 분포. (b) 격자결함 추적을 고려하지 않은 MDRANGE를 사용한 2차원적인 불순물 분포. (등고선 위의 숫자는 2차원적으로 추적된 불순물의 개수이며 각 간격을 50이다.)

Fig. 4. Calculated 2-dimensional dopant profiles due to 2 keV tilt 7° As ion implant into Si[100]. (a) result of MD using local damage accumulation model, and (b) result of MDRANGE considering no damage accumulation.

그림 5는 500 eV 붕소 이온 주입인 경우의 2D 불순물 분포이다. 그림 5(a)는 국부 격자결함 추적 모델

을 사용한 MD 결과이고, 그림 5(b)는 격자결함을 고려하지 않은 MDRANGE 결과이다.

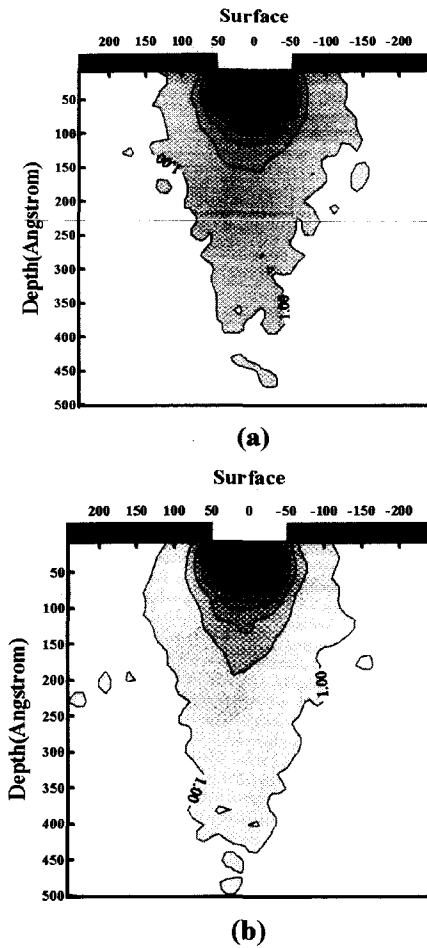


그림 5. Si[100] 실리콘 기판에 에너지 500 eV 붕소 이온 주입인 경우의 계산된 불순물의 분포. (a) 국부 셀 격자결함 추적 모델을 사용한 경우의 2차원적인 불순물 분포. (b) 격자결함 추적을 고려하지 않은 MDRANGE를 사용한 2차원적인 불순물 분포. (등고선 위의 숫자는 2차원적으로 추적된 불순물의 개수이며 각 간격은 50이다.)

Fig. 5. Calculated 2-dimensional dopant profiles due to 500 eV B implant into Si[100]. (a) result of MD using local damage accumulation model, and (b) result of MDRANGE considering no damage accumulation.

붕소의 경우에서도, 그림 4의 비소의 경우에서와 같이 그림 5(a)와 그림 5(b) 사이의 차이를 발견할 수 있다. 무거운 이온은 많은 격자결함을 발생시키지만 가벼운 이온은 비교적 적은 격자결함을 발생시키기 때

문에, 붕소의 경우인 그림 5(a)와 5(b)에서 그 차이가 비소의 경우인 그림 4(a)와 4(b)에서처럼 크게 나타나지 않는다. 그러나 국부 격자결함 추적 모델을 사용한 결과에서 붕소 채널링 발생은 격자결함을 고려하지 않는 결과에서 채널링 발생보다 더 적다는 것을 알 수 있다. 그림 4와 5에서 보여진 국부 격자결함 추적 모델의 효과는 그림 1과 2의 결과들과 일치한다.

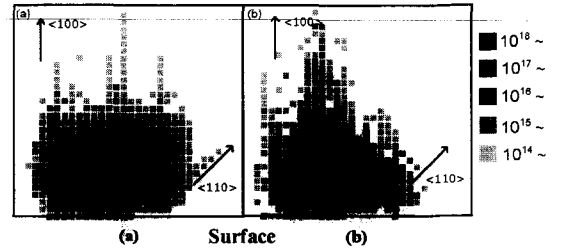


그림 6. Si[100] 실리콘 기판에 에너지 2 keV 경사도 7° 비소 이온 주입인 경우의 계산된 격자결함의 분포. (a) 국부 셀 격자결함 추적 모델을 사용한 경우의 2차원적인 격자 결함 분포. (b) 격자결함 추적을 고려하지 않은 MDRANGE를 사용한 경우 추적된 에너지에 따라서 계산된 2차원적인 격자결함 분포

Fig. 6. In the case of 2 keV tilt 7° As implant into Si[100], calculated 2-dimensional damage profile according to deposited energy. (a) result of local damage accumulation, and (b) result of MDRANGE with deposited energy in cell.

그림 6은 2 keV tilt 7° 비소 이온 주입 경우에 2차원적인 격자결함 분포를 비교하여 보여준다. 그림 6(a)는 격자결함 추적 모델을 사용한 MD에 따른 2D 격자결함 분포이고, 그림 6(b)는 MDRANGE를 사용하여 각 셀에 추적된 에너지(deposited energy)에 의해서 계산된 2D 격자결함 분포이다. 그림 6(a)에서, 격자결함 분포는 경사도 7°의 효과를 보여주고 있다. 또한 비소 이온의 <100> 방향과 <110> 방향의 채널링 현상으로 생성된 격자결함을 뚜렷이 보여준다. 주입된 이온이 이전에 주입된 이온으로 인한 연속적인 충돌에 의해서 생성된 격자결함들과의 충돌로 인하여 <100> 채널링 경우들이 감소되었기 때문에, 그림 6(a)의 격자결함 분포의 꼬리 부분은 그림 6(b)의 꼬리 분포보다 줄어든 것을 볼 수 있다. 그러나 <110> 방향 이온 채널링 경우들은 생성되어 있는 격자결함들로 인한 산란으로 약간 증가하여, 그림 6(a)

가 그림 6(b)보다 측면으로 약간 더 퍼져있는 것을 볼 수 있다.

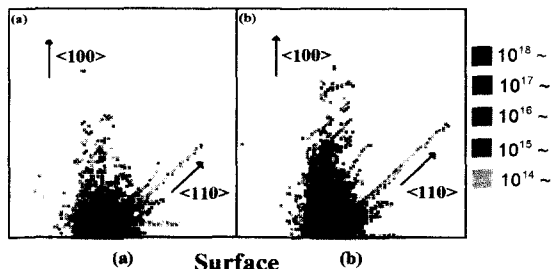


그림 7. Si [100] 실리콘 기판에 에너지 500 eV 붕소 이온 주입인 경우의 계산된 격자결함의 분포. (a) 국부 셀 격자결함 축적 모델을 사용한 경우의 2차원적인 격자 결함 분포. (b) 격자결함 축적을 고려하지 않은 MDRANGE를 사용한 경우 축적된 에너지에 따라서 계산된 2차원적인 격자결함 분포

Fig. 7. In the case of 500 eV B implant into Si [100], calculated 2D damage profile according to deposited energy. (a) result of local damage accumulation, and (b) result of MDRANGE with deposited energy in cell.

그림 7은 500 eV 붕소 이온 주입으로 인한 축적된 격자결함의 분포를 보여주고 있다. 그림 7(a)는 국부 격자결함 축적 모델을 사용한 결과의 격자결함 분포이고, 그림 7(b)는 격자결함 축적을 고려하지 않는 MDRANGE에서 각 셀에 축적된 에너지에 의해서 계산된 격자결함 분포이다. 붕소의 경우에 채널링이 비소의 경우의 채널링보다 더 많이 발생하기 때문에, 붕소의 축적된 격자결함의 꼬리 및 측면 분포는 국부적으로 모여있어서 분리된 영역(island domain)을 형성하고 있다.

IV. 결론

이온 주입 분포를 계산하기 위하여 효과적인 고전 분자 역학 방법이 사용되었다. MDRANGE 알고리즘을 사용하였고, 국부적인 비정질화와 실리콘 내부에서 일어나는 연속적인 충돌과정을 계산하는데 중요한 국부 셀 격자결함 축적 모델(local cell damage accumulation model)을 제안하여 극 저 에너지 비소 및 붕소 이온 주입에 관한 격자결함이 고려된 이온주입 분포를 시뮬레이션하였다. 제안된 모델은 1차원적인 농도 분포에서 SIMS 측정 및 다른 이론적인 결과들

과 잘 일치하였다. 격자결함을 고려하지 않은 MDRANGE는 불순물 분포의 꼬리 부분에서 실험치 및 제안된 모델을 사용한 시뮬레이션 결과와 많은 차이를 보였다. 이는 격자결함에 의한 채널링 억제 현상이 고려되지 못하였기 때문이라고 생각된다. 본 모델을 사용한 2차원적인 불순물 분포와 이를 사용하지 않은 MDRANGE의 2차원적인 불순물 분포를 비교하였다. 제안된 국부 셀 격자결함 축적 모델을 사용한 경우에는 사용하지 않은 경우보다 <100> 방향 채널링이 많이 줄어들었지만, <110> 방향 채널링은 약간 증가하였다. 2차원적인 격자결함 분포에서도 <100> 방향 및 <110> 방향으로 발생된 이온 채널링일때 발생된 격자결함이 보여졌고, 각 채널링 방향에 따른 국부적인 격자결함은 확실히 구분되었다. 붕소인 경우에 채널링은 비소인 경우의 채널링 경우들보다 더 많아서, 붕소 이온 주입에 따른 격자결함의 꼬리와 측면 분포는 국부적으로 모여있어서 분리된 영역을 형성하였다. 본 연구를 통하여 극 저 에너지 이온 주입에서 국부 격자결함 축적이 반드시 고려되어야 하는 것으로 사료된다.

향후 본 연구에서는 무시한 이온빔진류에 따른 격자결함 축적에 관한 연구들도 수행되어야 할 것이다. 또한 FCMD (full classical molecular dynamics)을 사용하여 이온 주입시 발생하는 격자결함의 특성을 연구하여 좀더 정확한 모델에 관한 연구가 수행되어질 것이다.

참 고 문 헌

- [1] J.D. Plummer, P.B. Griffin, "Challenges for predictive process simulation in sub 0.1 μ m silicon devices", *Nucl. Instr. and Meth. B*, Vol. 102, pp. 160, 1995.
- [2] M.J. Caturla, T. Diaz de la Rubia, L.A. Marques, and G.H. Gilmer, "Ion-Beam processing of silicon at keV energies: A molecular-dynamics study", *Phys. Rev. B*, Vol. 54, pp. 16683, 1996.
- [3] D.E. Harrison, Jr., in "Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences," edited by J.E. Greene(CRC, Boca Raton), Vol. 13, Suppl. 1., 1988.
- [4] "Atomic and Ion Collisions in Solid and at Surfaces : Theory, Simulation, and

- Application*," edited by R. Smith, Cambridge University Press, 1998.
- [5] J. W. Kang, M. S. Son, E. S. Kang, and H. J. Hwang, "A Study on Silicon Damages and Ultra-Low Energy Ion Implantation using Classical Molecular Dynamics", *J. Kor. Phys. Soc.*, Vol. 33 pp. S229, 1998.
- [6] K. M. Beardmore and N. G-Jensen, "Efficient molecular dynamics scheme for the calculatin of dapant profiles due to ion implantation", *Phys. Rev. E*, Vol. 57, pp. 7278, 1998.
- [7] K. Nordlund, Comp. "Molecular dynamics simulation of ion ranges in the 1-100keV energy range" *Mat. Sci.* Vol. 3, pp. 448, 1995.
- [8] K.M. Beardmore and N. G-Jensen, "An Efficient Molecular Dynamics Scheme for Predicting Dopant Implant Profiles in Semiconductors", *MRS 98 Fall Meeting*, 1998.
- [9] F.H. Stillinger and T.A. Weber, "Computer simulation of local order in condensed phases of silicon" *Phys. Rev. B*, Vol. 31, pp. 5262, 1985.
- [10] J. F. Ziegler, J. P. Biersack, and U. Littmark, "*The Stopping and Range of Ions in Solids*," Pergamon Press, New York, 1985.
- [11] K. Gartner et al., "Round robin computer simulation of ion transmission through crystalline layers", *Nucl. Instr. and Meth. B*, Vol. 102, pp. 183, 1995.
- [12] D. Cai, C.M. Snell, K.M. Beardmore, N. G-Jensen, "Simulation of Phosphorus Implantation into Silicon with a Single Parameter Electronic Stopping Power Model", *Int. J. Mod. Phys. C*, Vol. 9, pp. 459, 1998.
- [13] O.B. Firsov, *Soviet Physics JETP*, Vol. 36, No. 9, 1959.

 저 자 소 개



權五勤(正會員)

1986년 2월 중앙대학교 전자공학과 졸업. 1991년 2월 중앙대학교 대학원 전자공학과 석사. 1992년 3월-현재 중앙대학교 대학원 전자공학과 박사과정. 1993년 3월-현재 안동정보대학 전자정보통신과 조교수. 주

관심분야는 반도체 소자 및 공정물리, 이온주입 및 확산 모델링, 시뮬레이션

黃好正(正會員) 第35卷 D編 第3號 參照

현재 중앙대학교 전자공학과 교수

姜正遠(正會員) 第35卷 D編 第3號 參照

현재 중앙대학교 기술과학연구소 선임 연구원