

## 규소에 있어서 붕소의 확산에 대한 2차원적 수치해석 모델

고관영\* · 송준호\* · 윤석길  
금형설계과 · 재료공학과

### (요약)

본 연구에서는 불활성 분위기에서 규소에 대한 붕소의 예비석출과 주입에 대한 확산모델을 세워 수치해석법으로 최종 농도분포를 계산하였다. 확산계수의 모델로서는 공공기구를 사용하였으며, Fair모델을 사용하였다. 붕소의 표면농도는 내삽법에 의해 구하였다. 확산 방정식의 선형화 방법으로는 유한 차분법을 사용하였으며, 해법으로는 Stone의 SIP 방법을 적용했다. 시뮬레이션 결과와 실험치의 비교로부터 제시된 모델의 유효성을 확인하였다.

## Two dimensional numerical modelling boron diffusion processes in silicon

Koh Kowan-Young\* · Song Jun-Ho\* Yoon Sek-Keel  
Metal Mould Design · Materials Science and Engineering

### (Abstract)

In the present work, the final impurity distributions in silicon through boron diffusion processes in inert atmosphere were calculated using computer aided numerical analysis methods.

The diffusion coefficients of substitutional impurities were modeled with vacancy mechanism. It is assumed that the boron diffusion is governed by Fair model. The surface concentration of boron was approximated by the interpolation. For the linearization of diffusion equation the finite difference method was

\*울산전문대학 금형설계과

utilized. For the linearization of diffusion equation the finite difference method was utilized. For the solution of the resulting simultaneous equations the strong implicit procedure by Stone was used. It is observed that the simulated results of boron diffusions have been well-fitted to the experimental results.

## 1. 서 론

규소 반도체의 전기적 특성은 소자의 활성영역에서의 도핑된 불순물 농도분포에 의해 결정된다. 원하는 불순물 농도분포를 얻기 위한 방법으로는 열적활성화 방법이 가장 널리 쓰이고 있으며, 최근에는 이온 주입법도 사용되고 있다. 열적활성화 방법 사용시 농도분포를 계산하기 위해서는 경험적인 방법이 주로 쓰여졌으나, 컴퓨터로 기술의 발전에 따른 초집적화 경향에 힘입어 컴퓨터 시뮬레이션이 크게 각광을 받고 있으며 국내에서도 연구보고 되고 있다.<sup>[1][2]</sup>

본 연구에서는 불활성 분위기하에서 붕소의 예비석출과 주입시 도핑된 불순물 농도분포를 예측하는 2차원적 수치해석 프로그램(DIFS2D)을 연구 개발하고자 한다.

## 2. 확산공정과 확산 방정식

반도체 제조과정중의 불순물 확산공정은 예비석출과 주입의 두 공정으로 행하여 진다. 예비석출 공정동안 불순물 확산계수( $D_i$ )가 일정하다면, 보상오차 함수로 표시되는 도핑된 불순물 농도분포( $C$ )는 다음과 같다.

$$C(x,t) = C_s * \operatorname{erfc} \left( -\frac{x}{2(Dt)^{1/2}} \right)$$

여기서,  $C_s$ 와  $t$ 는 표면 불순물 농도와 확산 시간을 나타낸다.

주입공정동안 불순물 확산계수가 일정하다면 도핑된 불순물 농도는 아래의 가우스(Gauss)분포를 나타낸다.

$$C(x,t) = \frac{Q_0}{(\pi Dt)^{1/2}} * \exp \left( -\frac{x}{2(Dt)^{1/2}} \right)^2$$

$$Q_0 = 2 * C_s * (Dt)^{1/2} / \pi^{1/2}$$

확산방정식 (Ficks law)은 농도구배가 있는 상태에서 확산계수가 위치에 따라 큰 변화가 없다면 시간의 변화에 따른 농도변화는 2차원일 경우 다음으로 근화시킬 수 있다.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\nabla J = \nabla(D\nabla C) = D \nabla^2 C = D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right)$$

진성조건하에서 불순물 확산계수( $D_i$ )는 온도만의 함수가 되며 다음으로 표현된다.<sup>[3][4][5]</sup>

$$D_i(T) = D_0 * \exp \left( -\frac{\Delta E}{kT} \right)$$

$$D_i = D_i^0 + D_i'$$

$D_0$ 와  $\Delta E$ 는 확산상수와 확산에 필요한 활성화 에너지이며,  $D_i^0$ 와  $D_i'$ 는 중성 및 +1가 공공에 의한 불순물 확산계수이다.

외성조건하에서의 불순물 확산은 페르미준위의 변화, 전하상태의 공공농도에서 변화를 가져오며, 불순물과 +1가 공공의 상호작용은 +1가의 공공의 에너지 준위가 전자 대 가장자리 가까이에 있기 때문에 붕소와 같은 p형 불순물이 규소내부에 도핑됐을 때 존재한다. 이때 확산계수( $D_e$ )는 다음으로 표현된다.<sup>[3][6][7]</sup>

$$D_e = D_i^0 \frac{(V^0)_e}{(V^0)_i} + D_i^+ \frac{(V^+)_e}{(V^+)_i} = D_i^0 + D_i^+ \frac{P}{n_i}$$

여기서,  $V^0$ ,  $V^+$ 와  $P$ 는 중성 및 +1가 공공과 정공농도이다.

규소내의 온도에 의존하는 에너지 겹( $E_g(T)$ )을 고려한 진성 캐리어 농도( $n_i$ )는 다음과으로 표현된다.<sup>6)8)</sup>

$$n_i(T) = 5.096726817 * 10^{15} * T^{3/2} * e^{-E_g/2KT}$$

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha * T^2}{(T + \beta)}$$

$$\alpha = 4.73 * 10^{-4}, \beta = 636.0$$

### 3. 봉소의 확산계수 모델

봉소의 확산은 일반적으로 낮은 표면농도로 이루어 지지만, 종종 높은 표면농도로 행하여진다. 낮은 표면농도( $< 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ )에서는 Erfc 함수나 Gaussian 함수가 봉소의 농도분포를 나타내지만 고농도에서는 부정확하다. 고농도 표면확산인 경우는 확산계수가 봉소의 국부적인 농도에 의존한다. Fair<sup>9)</sup>에 의하면  $B^{-1}$ 이온이 양전하를 띤 공공과의 상호작용에 의한 봉소의 확산계수는 봉소의 농도에 선형 의존하며 다음의 형태로 표현되어 진다.

$$\frac{D_e}{D_i} =' \frac{C}{n_i} \quad (1)$$

봉소의 농도와 확산계수 사이의 직선적인 관계는 여러 가능한 확산기구를 제시하지만 Watkin<sup>10)</sup>은 규소내부에 이온화된 억셉터형 원자와 양전하를 띤 단일공공(monovacancy) 사이의 전기적인 상호작용을 제시하였고, Crowder<sup>11)</sup>는 양전하를 띤 결함이 규소에서 봉소의 확산을 지배한다고 하였다. 그리고 Thurmond<sup>5)</sup>는 가전자대 에너지 준위(Ev) 위에  $+0.37\text{eV}$ 에너지 준위에 도우너형 공공이 존재한다고 가정함으로써 낮은 온도에서 공공의 형성에 대한 정확한 엔탈피와 엔트로피값을 구해냈다. 위와 같은 연구 결과에서 +1가 공공이  $Ev+0.37\text{eV}$ 의

에너지 준위를 공유한다는 것은  $800\text{K}$ 이상에서 +1가의 공공이 P형 규소에서 단일공공의 지배적인 전하상태이다. 따라서, 봉소이온이 +1가의 공공과 상호작용하여 확산한다고 생각할 수 있다.

봉소의 확산계수가 진성규소에서는  $D_i$ 이고, 이온화된 공공의 농도에 비례한다면, 봉소의 농도가 증가하면 +1가 공공은 증가하고 확산계수는 식(1)에 의해 다음으로 쓸 수 있다.

$$\frac{D_e}{D_i} = \frac{P}{n_i}$$

즉, 봉소의 확산은 비산하성 분위기하에서 단일공공에 의해 확산하고 농도에 선형 의존을 나타낸다. 결론적으로, 고농도 봉소 확산에서는 내부전장효과(H)를 고려하면 유효확산계수(DEDC)가 다음의 형태로 주어진다.<sup>9)</sup>

$$DEDC = H * [ D_i^0 + D_i^+ \{ \frac{P}{n_i} \} ]$$

$$D_i^0 = 0.15 \exp \left( \frac{3.59}{KT} \right)$$

$$D_i^+ = 3.02 \exp \left( \frac{3.59}{KT} \right)$$

### 4. 수학적인 모델

2차원 공간에서 확산 제2법칙의 해를 수치해석적으로 구하기 위하여, 이 확산에 대한 미분 방정식은 정규화된 다음, 유한 차분법에 의해 선형화되며 다음으로 표현된다.

$$\frac{C_{i,j}^{N+1} - C_{i,j}^N}{\Delta t} = \theta (\nabla^2 C^{N+1}) + (1 - \theta) \nabla^2 C^N \quad (2)$$

식(2)에서 시간간격( $\Delta t$ )의 선택법에 관계없이 수렴보장을 위해 완전한 Implicit 법( $\theta = 1$ )을 이용하였다. 차분법을 적용하기 위한 격자(Mesh)와 점(Node)에 대한

모델은 전보<sup>12)</sup>에 나타내었다. 이 확산 방정식의 우변에 있는 공간좌표에 대한 2차 미분에 대해서는 중심차분을, 좌변에 있는 미분에 대해서는 전진차분을 적용하고<sup>13)</sup> 원자유속(Flux)을 계산하기 위한 벡터점의 확

산계수는 양쪽점의 확산계수값을 내삽법에 의해 근사화하여 구하였다. 확산 방정식의 우변에 대한 차분표현과 확산계수는 다음과 같다.

$$\nabla^2 C^N = \frac{Di+(1/2), j(C_{i+1,j}^N - C_{i,j}^N) / hi - Di-(1/2), j(C_{i,j}^N - C_{i-1,j}^N) / hi-1}{H} + \frac{Di,j+(1/2)(C_{i,j+1}^N - C_{i,j}^N) / gi - Di,j-(1/2)(C_{i,j}^N - C_{i,j-1}^N) / gi-1}{G}$$

$$Di+(1/2), j = \frac{Di,j + Di+1,j}{2} \quad (3)$$

여기서,  $C^N$ 은 N번째 시간간격 즉,  $N * \Delta t$ 시간의 해를 의미하며, G와 H는 다음으로 표현된다.

$$G = \frac{gi + gj-1}{2}$$

$$H = \frac{hi + hi-1}{2}$$

$\theta$ 가 1인 완전한 Implicit 법으로 확산 계2법칙의 미분 방정식을 유한 차분화하고  $(N+1) * \Delta t$  시간에 대한 유한 차분식을 정리하면 다음 식과 같은 선형식을 얻을 수 있다.

$$ai,j C_{i,j-1}^{N+1} + bi,j C_{i-1,j}^{N+1} + ci,j C_{i,j}^{N+1} + di,j C_{i+1,j}^{N+1} + ei,j C_{i,j+1}^{N+1} = pi,j \quad (4)$$

$$ai,j = - \frac{Di,j+(1/2)}{G * gj-1}$$

$$bi,j = - \frac{Di(1/2),j}{H * hi-1}$$

$$di,j = - \frac{Di+(1/2),j}{H * hi}$$

$$ci,j = - \frac{Di,j+(1/2)}{G * gi}$$

$$ei,j = - (ai,j + bi,j + di,j + ci,j) + (1 / \Delta t)$$

$$pi,j = - \frac{C_{i,j}^N}{\Delta t}$$

식 (4)를 격자점(Mesh point)들 중 경계 조건에 의해 그 해를 미리 알고 있는 점<sup>12)</sup>들을 제외한 모든 격자점에 대해 적용하면 다음과 같은 행렬 표현식을 얻을 수 있으며, 해법 프로그램인 Stone의 SIP법<sup>14)</sup>을 이용하여 도핑된 불순물 농도 분포를 계산한다.

$$M * C = P$$

여기서, M은 5-대각선이 영이 아닌 희소 비대칭이며 양의 한정(Positive definite) 행렬이다. C는  $(N+1) * \Delta t$  시간에서의 변수인 농도 벡터이며, P는 이전 시간에서 계산된 해와 시간 구간  $\Delta t$ 에 의해 구할 수 있는 값으로 Pertinent vector라 한다.

## 5. 결과 및 고찰

### 5.1 불소의 예비석출

봉소의 예비석출 공정에서는 1000°C에서 30분과 950°C에서 30분 동안 모의 실험을 하였다. 그림 1은 규소 웨이퍼에 봉소를 1000°C에서 30분간 예비석출하였을 때의 시뮬레이션 결과를 Oh 등<sup>1,2)</sup>의 실험치 및 시뮬레이션 결과(DIFSIM)와 함께 1차원적으로 도시한 것이다. 고농도( $>10^{19}\text{cm}^{-3}$ )에서는 DIFSIM의 시뮬레이션 결과 및 실험치에 상당히 근사하지만, 저농도( $<10^{19}\text{cm}^{-3}$ )에서는 약간의 오차가 발생한다. 이는 온도에 무관한 에너지 캡을 사용한 DIFSIM 모델과 온도에 의존하는 에너지 캡을 사용한 DIFS2D 모델의 차이이다. 그러나, 본 시뮬레이션 결과가 저농도에서 농도 분포를 DIFSIM 모델보다 더 정확히 예측한다. 왜냐하면, 실험치에서 농도분포가 약  $5.0 \times 10^{19}\text{cm}^{-3}$ 인 점에서 부터 DIFSIM 모델에 양의 편차를 나타내고 있기 때문이다. 그림 2는 1000°C에서 30분간 규소웨이퍼에 봉소를 예비석출 시켰을 때의 농도 분포를 2차원적으로 도시한 그림이다. 그림 3은 봉소를 950°C에서 30분간 예비석출 시킨 후 농도분포를, 이 예비석출후 1000°C에서 20분간 주입시켰을 때의 농도분포와 1차원적으로 비교 도시한 그림이다. 이를 그림에서 알 수 있듯이 확산온도가 증가하면 봉소 확산계수의 온도 의존성이 때문에 확산깊이는 증가한다.

## 5. 2 봉소의 주입

주입공정은 예비석출된 봉소의 불순물을 더 깊이 확산시켜 확산깊이를 조절하는 공정이며, 1050°C에서 20분과 1000°C에서 20분인 경우를 시뮬레이션 하였다. 그림 4는 봉소를 1000°C에서 30분간 예비석출 시킨 후, 1050°C에서 20분간 주입시켰을 때의 Y 방향의 최종 농도분포를 DIFSIM의 실험치 및 시뮬레이션 결과와 함께 1차원적으로 비교 도시한 것이다. 여기서도 예비석출 공정에서와 같이 온도에 의존하는 에너지 캡을 고려한 영향 때문에 DIFS2D가 DIFSIM에

양의 편차를 나타낸다. DIFS2D의 시뮬레이션 결과가 실험치와 표면근처에서 약간의 오차가 발생하는데, 이것은 실제 실험에서 는 기체 분위기 방향으로 표면의 봉소가 Out-diffusion하는 현상이 있지만, 본 연구에서는 이 현상을 고려하지 않았기 때문이다. 그림 5는 1000°C에서 30분간 예비석출 시킨 봉소를 1050°C에서 20분간 주입 시켰을 때 도평된 농도 분포를 2차원적으로 도시한 것이다. 그림 6과 7은 봉소를 950°C에서 30분간 예비석출 시킨 후, 이 도평된 불순물을 1000°C에서 20분, 1050°C에서 20분간 주입공정 후의 농도분포를 2차원적으로 도시한 것이다. 이 두 그림에서, 확산시간을 일정하게 놓고 확산온도를 증가시키면 봉소의 확산계수 증가에 의해 확산깊이가 증가함을 알 수가 있다.

## 6. 결 론

본 연구에서는 규소집적회로에 일반적으로 쓰이는 봉소가 불활성 분위기하에서 예비석출과 주입 공정시, 도평된 2차원 농도분포를 예측할 수 있는 수치해석 프로그램 (DIFS2D)을 개발하였다.

봉소의 확산계수의 기본적인 기구로서는 공공기구를 사용하였으며, Fair 모델을 사용했다. 설정한 확산계수 모델을 가지고서 확산 방정식을 선형화시켜 Stone의 SIP법을 이용하여 봉소의 최종농도분포를 계산하였다. 여러 가지 온도와 시간에서의 DIFSIM의 실험치와 비교하여 본 결과, 상당히 가까운 시뮬레이션 결과를 얻을 수 있었다. 그러나 시뮬레이션 결과의 오차를 줄이기 위해서는 Out diffusion에 대한 모델이 고려되어야 한다고 생각한다.

## 7. 참고문헌

- Y. Y. Yang, C. M. Kyung and H. C. Oh: J. Kor. Elect. Eng., 22, 5

- (1985)
2. H.C. Oh and C.M. Kyung: J. Kor. Elect. Eng., 21, 11(1984).
  3. S.M.Sze: VLSI Technology, McGraw Hill, Chap 5, 1(1985).
  4. D.L.Kendall and D.B.De Vries: Diffusion in Silicon, NY, 1967.
  5. D.Shaw: Phys. Stat. Sol. (b)72, 11 (1975).
  6. C.D.Thurmond: J. Electrochem. Soc. 122, 1133(1975).
  7. S.P.Gaur and D.H.Navor: IEEE Trans. Electron Device, 23, 50 (1976).
  8. R.A.Colclaser: Microelectronics Processing and Device Design, Wiley, NY, 1980.
  9. R.B.Fair: J. Electrochem. Soc., 122, 800(1975).
  10. G.D.Watkins: Phys. Rev., 155, 802 (1967).
  11. B.L.Crowder et al: Ion Implantation in Semiconductor and other Materials, B.L.Crowder, Editor, p. 267, Plenum, NY, 1973.
  12. 고관영, 이종화, 윤석길: UOU Report, 1992 (To be published)
  13. G.D.Smith: Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Methods, Second Edition, in J.Crank, H.G.Martin, D.M.Melluish, Editors, Clarendon Press, Oxford, 1978.
  14. H.L.Stone: Iterative Solution of Implicit Approximations of Multidimensional Partial Differential Equations, Siam J.Numer. Anual, Vol. 5, No. 3, 1968.

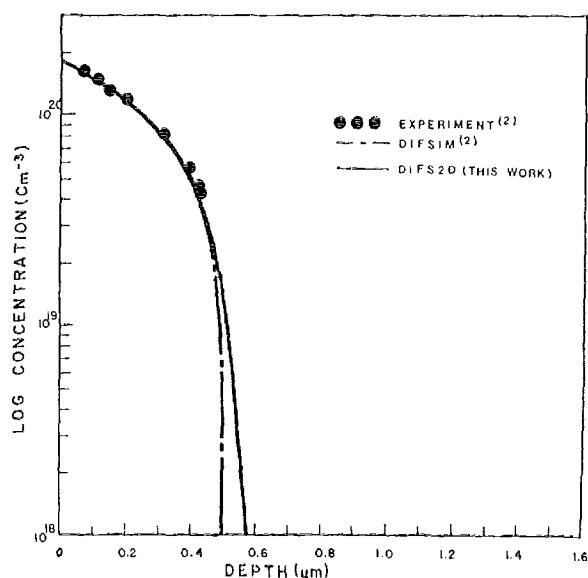


Fig. 1. Comparison of simulation and experimental results for the predeposition at 950°C, 30 Min.

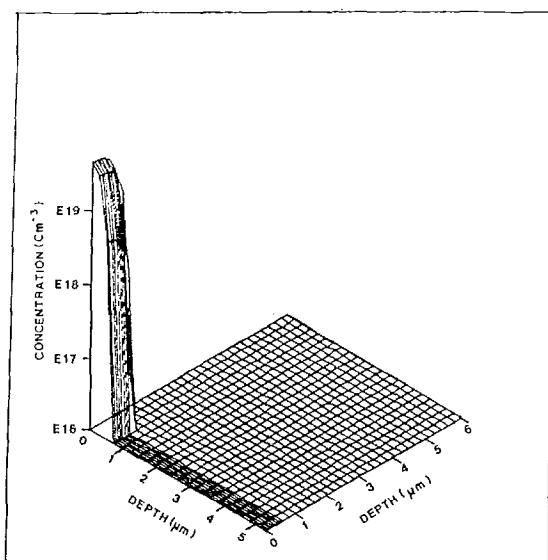


Fig. 2. Two dimensional profile of boron due to predeposition at 1000°C, 30 Min.

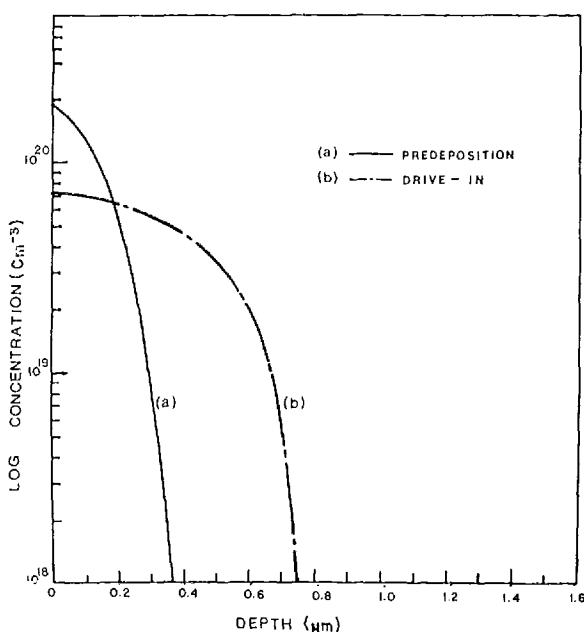


Fig. 3. Simulated concentration profile of boron due to  
 (a) predeposition at 950°C, 30 Min.  
 (b) drive - in at 1000°C, 20 Min.

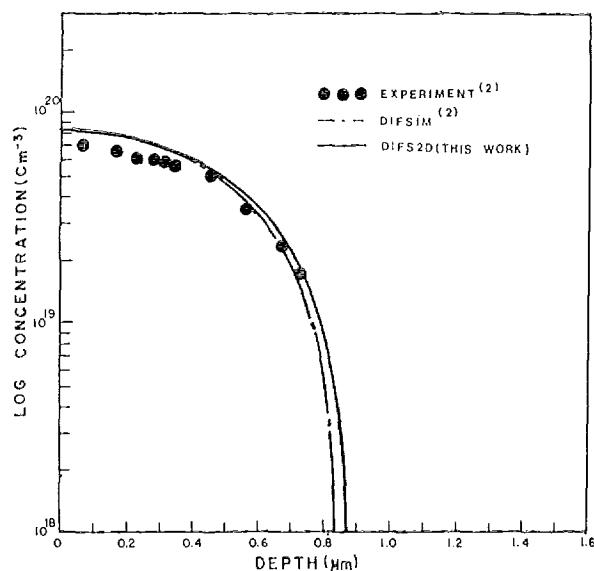


Fig. 4. Comparison of simulation and experimental results for the drive - in of boron at 1050°C, 20 Min. after predeposition at 1000°C, 30 Min.

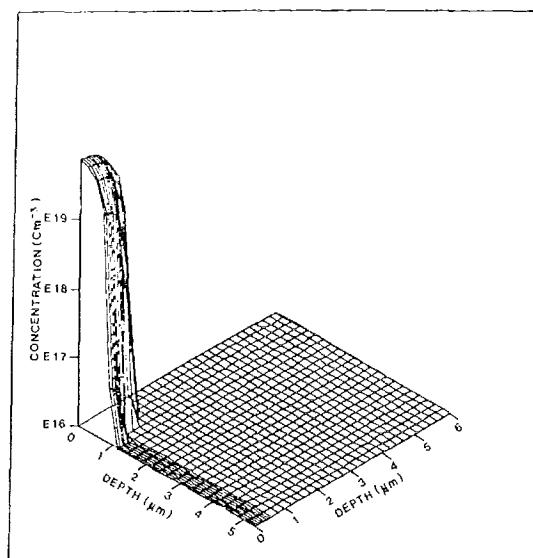


Fig. 5. Two dimensional profile of boron due to drive - in at 1050°C, 20 Min. after predeposition at 1000°C, 30 Min.

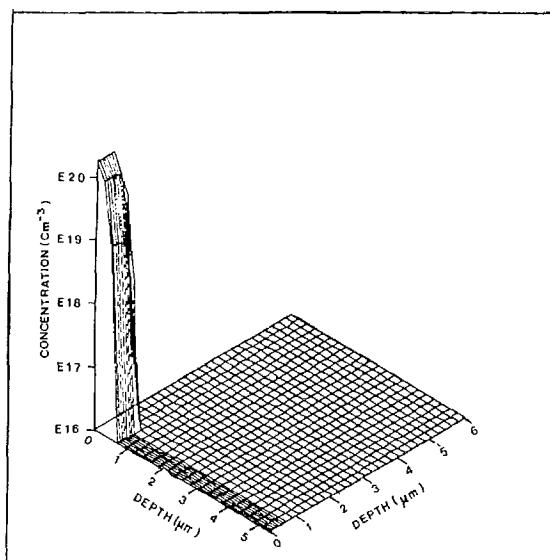


Fig. 6. Two dimensional profile of boron due to drive - in at 1000°C, 20 Min. after predeposition at 950°C, 30 Min.

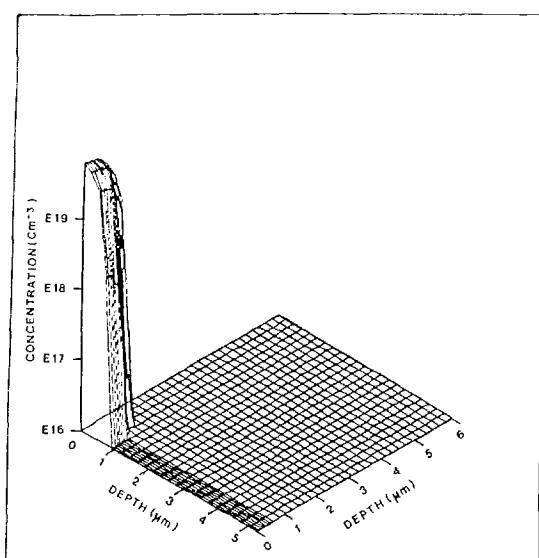


Fig. 7. Two dimensional profile of boron due to drive - in at 1050°C, 20 Min. after predeposition at 950°C, 30 Min.