

규소에 있어서 인의 확산공정에 대한 2차원적 수치해석 모델

고관영* · 이종화 · 윤석길**

금형설계학과 · 전자전산기공학과 · 재료공학과

〈요 약〉

반도체 집적회로 제조과정중의 불순물 확산공정은 일반적으로 예비석출과 주입의 두 공정으로 이루어진다.

본 연구에서는 불활성 분위기나 질소 분위기에서 인의 예비석출과 주입을 시행할시 확산에 대한 모델을 설정함으로써 수치해석법에 의해 최종 농도분포를 계산하였다. 확산계수의 모델로서는 공공기구를 기초하여 Fair와 Tsai가 제시한 모델을 사용하였다. 고농도 인의 확산 경우에는 불순물 원자로 인한 변형때문에 생기는 에너지 갭 감소효과를 고려하였다. 인의 표면 농도는 내삽법으로 구하여 사용하였다. 확산 방정식을 선형화하기 위하여 유한 차분법을 사용하였으며, 해를 구하기 위해서는 Stone의 SIP 방법을 적용하였다.

Two dimensional numerical modelling of phosphorus diffusion processes in silicon

Koh Kowan-Young* · Lee Jong-Hwa · Yoon Sek-Keel**

〈Abstract〉

The impurity diffusion processes in semiconductor integrated circuit fabrication, in general, consist of predeposition and drive-in diffusions.

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

* 울산전문대학 금형설계학과

**울산대학교 재료공학과

The diffusion coefficients of substitutional impurities were modeled with vacancy mechanism. It is assumed that the phosphorus diffusion is controlled by Fair and Tsai model. An effect of the narrowed energy gap due to the strain by very high concentration of phosphorus was approximated by the interpolation. 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..

List of symbols

Symbol	Description
C, Cs	도핑 및 표면 불순물 농도
D_0	'무한대의 온도까지 외삽한 확산상수
D, DEDC	불순물 및 유효 확산계수
D_i^{+n}, D_e^{+n}	진성 및 외성조건하에서의 +n가 공공에 의한 불순물 확산계수
D_i, D_e	진성 및 외성조건하에서의 전 확산계수
ΔE	확산에 필요한 활성화 에너지
$E_g(T)$	임의의 온도에서 에너지 갭
H	내부 전장효과 인자
$(h^+)_e$	외성조건하에서의 +1가 효율 농도
$K(T)$	임의의 온도에서의 평형상수
K, KT	Boltzmann 상수 및 열에너지
n_e, n_s	킹크 농도 및 표면 전자농도
n_i^{+r}, n_e^{+r}	진성 및 외성조건하에서의 +r가 전자농도
n_i, n_{ie}	진성 및 유효 진성 전자농도
n, p	전자 및 정공농도
q	전자의 전하량
$(V^{+n})_i, (V^{+n})_e$	진성 및 외성조건하에서의 +n가 공공농도
ϵ_s	반도체의 유전율($1.053647420 \times 10^{12}$)

1. 서 론

규모 집적회로의 기본소자인 MOS와 쌍극성 트랜지스터, 다이오우드 등의 전기적 특성은 주로 소자의 활성영역에서의 도핑된 불순물 농도분포에 의해 결정되므로 불순물 확산공정은 반도체 제조공정중에서도 가장 중요한 공정이다. 활성영역에서의 원하는 불순물 농도분포를 얻기 위한 방법으로는 여러 가지 방법이 있으나 그 중에서도 열적

활성화 방법이 가장 널리 쓰이며, 최근에는 이온 주입법도 쓰이고 있다. 70년도 후반까지만 해도 원하는 불순물 농도분포를 얻기 위하여 실험적으로 산출된 분포를 직관적으로 조정하는 경험적인 방법이 주로 쓰여졌으나, 집적회로의 기술이 급속도로 초집적화에 따라, 이 방법은 모든 측면에서 비경제적이기 때문에 최근 이러한 단점을 보완한 컴퓨터 시뮬레이션 방법이 매우 활발히 연구되고 있으며, 국내에서의 연구결과

도 보고된 바 있다.¹²⁾

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

2. 기본 확산공정과 확산 방정식

2.1 기본 확산공정

일반적으로 반도체 제조과정중의 불순물 확산공정은 예비석출과 주입의 두 공정으로 행하여진다.

(1) 예비석출

예비석출은 불순물 확산공정의 1단계 공정이고, 규소 웨이퍼가 수소, 질소와 불순물 화합물(PCI₃, B₂H₆, POCI₃)의 혼합기체 분위기의 확산로에 장입되어 주어진 온도에서 최대고용한도를 유지함으로써 확산시간 동안 일정한 표면 불순물 농도를 유지하는 공정이다. 고전적으로 불순물 확산계수가 일정하다면, 도핑된 불순물 농도분포를 아래의 보상오차 함수로 표시될 수 있으며

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

이때 총 예비석출된 불순물 양은 다음과 같은 식으로 표시된다.

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

(2) 주입

예비석출 확산공정에 의해 일정한 양의 불순물이 도핑된 상태의 확산이다. 확산은 이 한계적인 소스(Source)로부터 행하여지고, 이 유한크기의 확산소스가 전부 확산한다고 가정한다. 이때 고전적으로 불순물 확산계수가 일정하다면 도핑된 불순물 농도는 아래의 가우스(Gauss)분포를 갖게 된다.

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

2.2 확산 방정식

(1) 확산 제1법칙

농도분포가 서로 다른 두 시편을 접촉하여 가열하면, 농도구배가 상쇄되는 방향으로 서로 확산하여 농도구배는 소멸된다. 확산이 농도가 일정한 면에 수직으로 일어난다고 가정하고 금속내에서 용질원자와 용매원자 사이의 상호작용이 없이 공공에 의해 원자가 이동할 때, 유속(Flux)은 다음과 같이 표현된다.

$$J = -D * \frac{\partial C}{\partial x} \quad (1 \text{ 차원})$$

$$J = -DVC \quad (3 \text{ 차원})$$

(2) 확산 제2법칙

Fick의 법칙은 정상상태 뿐만 아니라 비정상 상태에서도 성립하며, 농도구배가 있는 상태에서 시간의 변화에 따른 농도변화는 다음으로 표시된다.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\nabla J = \nabla (D \nabla C)$$

위 식에서 D가 불순물 농도의 함수이지만 위치에 따라 큰 변화가 없다면 2차원일 경우 다음으로 근사화시킬 수 있다.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = DV^2 C = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) \quad (1)$$

2.3 확산계수와 페르미 에너지

치환형 불순물 농도분포에 대한 확산계수의 이론적 고찰은 ZnS에서 공공과 불순물 원자의 상호작용에 바탕을 둔다. 공공의 전하상태는 상호작용에 영향을 미치고 이 영향으로 인하여 유효확산계수(D_{eff})가 생긴

다. 또한 이들 공공들은 다른 방법으로 확산하는 불순물 이온들과도 상호작용을 한다. 결과적으로 점프 확률, 활성화 에너지가 불순물의 확산계수에 관련되며 유효확산계수는 불순물 농도가 진성 캐리어 농도보다 적으면 온도만의 함수가 되고, 크면 불순물 농도에 관한 함수가 된다.

(1) 진성 반도체 규소내의 불순물 확산계수

불순물 농도가 임의의 온도에서 진성 캐리어 농도보다 적은 상태를 진성조건이라고 하며, 이때의 불순물 확산계수는 온도만의 함수가 되며 다음으로 표현된다.³⁾

$$D(T) = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{\Delta E}{KT}\right)$$

그리고 규소내의 온도에 의존하는 에너지 갭을 고려한 진성 캐리어 농도 (n_i)는 다음으로 표현된다.⁴⁾⁵⁾

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

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

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

즉 온도가 증가하면 에너지 갭은 감소하므로 진성캐리어 농도는 증가하여, 온도가 11℃씩 증가할 때마다 진성 캐리어 농도는 약 2배씩 증가한다.

진성 조건하에서는 확산계수가 온도만의 함수이므로 식(1)이 성립하고 확산계수는 다음으로 쓸 수 있다.⁶⁾⁷⁾

$$D_i = D_i^0 + D_i^+ + D_i^- + D_i^2$$

(2) 외성 반도체 규소내의 불순물 확산계수

임의의 온도에서의 진성 캐리어 농도보다 불순물 농도가 큰 경우를 외성조건이라고

한다. 이 조건하에서의 불순물 확산은 페르미 준위의 변화를 가져올 뿐만 아니라, 여러가지 전하상태의 공공농도에서 변화를 가져온다. 외성 조건하에서의 확산계수는 다음으로 표현된다.⁸⁾

$$D_c = D_i^0 \frac{(V^0)_e}{(V^0)_i} + D_i^+ \frac{(V^+)_e}{(V^+)_i} + D_i^- \frac{(V^-)_e}{(V^-)_i} + D_i^2 \frac{(V^2)_e}{(V^2)_i}$$

여기서 중성공공의 농도는 불순물 온도의 변화에 의한 페르미 준위 변화에 무관하다. 따라서 외성 조건하에서의 중성공공의 농도는 진성 조건하에서의 중성공공의 농도와 같다. 그러나 나머지 이온화된 상태의 공공농도는 페르미 준위에 의하여 결정되며, 질량 작용의 법칙을 사용하고 축퇴(Degeneracy)효과를 무시하면 -1가 공공의 생성 반응식에 대하여는 평형상수($K(T)$)를 다음으로 쓸 수 있다.

$$V^0 + e^- = V^-$$

$$K(T) = \frac{(V^-)_e}{(n^-)_e \cdot (V^0)_e}$$

그리고 진성조건에서는 $n = p = n_i$ 이므로 다음과 같다.

$$K(T) = \frac{(V^-)_i}{(n^-)_i \cdot (V^0)_i}$$

또한, $(V^0)_i = (V^0)_e$ 와 $K(T)$ 는 온도만의 함수이므로 $(n^-)_e = n$ 로 표현하면 위 두 식을 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\frac{(V^-)_e}{(V^-)_i} = \frac{n}{n_i}$$

따라서 외성 반도체 규소내의 불순물 확

산계수는 전자와 정공의 농도로 표현되며, 내부전장 효과를 고려하면 다음과 같다.³⁾

$$D_e = D_i^0 + D_i^+ \frac{p}{n_i} + D_i^- \frac{n}{n_i} + D_i^2 \left(\frac{n}{n_i}\right)^2$$

$$D_{HC} = H * D_e$$

$$H = 1 + \left(\frac{n}{n_i}\right) * \left[\left(\frac{n}{2n_i}\right)^2 + 1\right]^{-1/2}$$

(3) 페르미 준위

주기율표에서 3족, 5족 원소들은 규소내부에 치환형으로 확산하기 때문에 확산계수는 공공의 전하상태와 농도에 의해 강하게 영향을 받는다.

불순물과 +1가 공공의 상호작용은 +1가의 공공의 에너지 준위가 가전자대 가장자리 가까이에 있기 때문에 붕소와 같은 p형 불순물이 규소내부에 도핑됐을때 존재한다. 불순물과 -1가 및 -2가 공공의 상호작용은 -1가 및 -2가 공공의 에너지 준위가 전도대 가장자리에 있기 때문에 인과 같이 n형 불순물이 규소내부에 도핑됐을때 존재한다.⁵⁾

3. 인의 확산계수 모델

규소에 있어서의 고농도 인의 확산은 Erfc 함수나 Gaussian 함수와는 매우 다른 분포를 나타내며⁹⁾¹⁰⁾ 일반적으로 표면영역, 전이영역, 및 꼬리영역으로 정의되는데 이 모델은 그림 1에 나타내었다. 이러한 인의 확산에 대한 모델로써, Peart와 Newman¹¹⁾은 인의 농도 분포 중 고농도 영역의 확산은 이온화한 인(P⁺)과 -2가 공공사이의 쌍(P⁺V²⁻)에 의해 생기고, 페르미 준위가 Ec-0.11(eV)의 -2가 공공 억셉터 준위 이하로 떨어질 때 P⁺V²⁻쌍이 분해되고, 여기서 생성된 비평형 공공은 꼬리영역에서의 인 확산을 증가시킨다고 제시하였다. 그리고 Fair와 Tsai¹²⁾는 인은 주로 중성공공에 의해 확산하지만 확산은 3가지의 서로 다른 전하상태로의 공공들에 의해 확산한다고 제시하였다. -2가 공공

은 페르미 준위가 Ec-0.11(eV)에서 분해되어 과잉 -1가 공공을 생성하고, 이 과잉 -1가 공공은 꼬리영역에서의 인 확산을 증가시키며, 전이영역의 확산은 P⁺V⁺쌍의 형성에 의해서 지배된다고 하였다. 각 영역에 대한 Fair와 Tsai의 모델은 다음과 같다.

3.1 표면 영역

이 영역은 고농도 인의 농도를 나타내는 영역으로서 확산은 P⁺V⁰쌍과 다음의 방정식에 의해서 형성하는 P⁺V²⁻쌍에 의해서 지배되며,

$$P^+ + V^2 = P^+ V^2 \tag{2}$$

확산계수는 다음과 같이 표현된다.

$$D_{HC} = H \left[D_i^0 + D_i^2 \left(\frac{n}{n_i}\right)^2 \right]$$

$$D_i^0 = 3.85 \exp\left(\frac{3.66}{KT}\right) \tag{3}$$

$$D_i^2 = 44.2 \exp\left(\frac{4.37}{KT}\right)$$

표면영역은 2가의 음전하를 띤 공공이 전자 1개를 내놓을 확률이 급격히 증가하는 점, 즉 페르미 준위가 전도대(Ec)의 0.11(eV) 아래로 떨어지는 점에서 끝나게 되는데, 이 점에서의 전자농도(ne)는 다음의 식으로 표현된다.¹²⁾

$$n_e = 4.65 * 10^{21} * \exp\left(-\frac{0.39}{KT}\right) \tag{4}$$

Fair와 Tsai의 모델에 의하면 표면영역에서의 전자농도와 불순물 농도의 관계는 C = n + 2.04 * 10⁻¹¹ * n³의 식을 만족시키는데, 거리에 따른 전자농도 기울기가 완만하므로, 본 연구에서는 간단히 하기 위하여 표면전자농도(n_s)를 1.5 * 10²⁰(cm⁻³)으로 일정하다고 가정하였다.

3.2 전이영역 (Transition region)

이 영역은 P^+V^0 쌍과 다음의 방정식에 의해 생성된 P^+V^- 쌍에 의한 확산이 지배적이고,

$$P^+V^2 = P^+V^- + e^- \quad (5)$$

확산계수는 다음 식에 나타낸 바와 같이 $(\frac{n_i}{n})^2$ 에 비례하여 증가한다.

$$D_{HC} = H * [D_i^0 + K * (\frac{n_i}{n})^2] \quad (6)$$

여기서 K는 비례 계수이며, 1000 °C의 확산계수 실험 데이터¹²⁾로부터 이용하였다.

3.3 꼬리영역 (Tail region)

전이영역에서 생긴 -1 가 공공이 꼬리영역으로 빠르게 이동하여 인의 확산을 증가시키고 확산계수는

$$D_{HC} = H * [D_i^0 + D_i \frac{(V^-)_e}{(V^-)_i}] \quad (7)$$

으로 표현된다. 표면 ($n = n_s$) 영역에서 P^+V^2 쌍 형성방정식 (2)에 질량 작용의 법칙을 적용하면,

$$\frac{(P^+V^2)_e}{(P^+V^2)_i} = (\frac{n_s}{n_i})^3 \quad (8)$$

$$D_{HC} = H * [D_i^0 + D_i \{ \frac{n_s^3}{n_i * n_e^2} (1 + \exp(\frac{0.3}{KT})) \}] \quad (12)$$

$$D_i = 4.44 \exp(\frac{4.00}{KT})$$

3.4 전체 인 농도와 이온화한 인 농도의 관계

이 된다. 그리고, 표면농도가 n_e 점에 도달해서는 급격히 분해됨으로 다음의 쌍분해 방정식이 성립되어

$$P^+V^2 = P^+V^- + e^- = P^+ + V^- + e^-$$

질량 작용의 법칙을 적용하면,

$$\frac{(V^-)_e}{(V^-)_i} = (\frac{n_i}{n_e})^2 * \frac{(P^+V^2)_e}{(P^+V^2)_i} \quad (9)$$

으로 쓸 수 있다. 식(8)과 식(9)을 이용하면,

$$\frac{(V^-)_e}{(V^-)_i} = \frac{n_s^3}{n_i * n_e^2} \quad (10)$$

을 얻게된다.

그리고, 분해과정이 P^+V^- 쌍 결합에너지가 P^+V^2 쌍 결합에너지 보다 작기 때문에 더욱더 촉진된다는 것을 고려하면,

$$\frac{(V^-)_e}{(V^-)_i} = \frac{n_s^3}{n_i * n_e^2} [1 + \exp(\frac{0.3}{KT})] \quad (11)$$

으로 표현된다.¹¹⁾ 이 방정식에서 $\exp(\frac{0.3}{KT})$ 은 P^+V^2 쌍에 대한 P^+V^- 쌍의 분해비율이며, 0.3(eV)은 P^+V^- 쌍의 결합 에너지이다. 그리고, 분해과정에서 생성된 한개의 전자는 전도대로 이동해 간다. 식(11)을 식(7)에 대입하여 얻어진 꼬리영역에서의 확산계수는 다음과 같이 표현된다.¹²⁾

인의 경우에는 붕소와는 다르게 규소내의 인이 모두 전기적으로 이온화 되지 못한다.

이 현상은 인의 농도가 크면 클수록 더욱 더 커지며 전체 인 농도(C)와 이온화한 인의 농도 즉 전자농도(n) 사이에는 다음의 관계식이 성립한다.¹³⁾

$$C = n + 5.33 * 10^{-23} * n^3 * \exp\left(\frac{0.4}{KT}\right) \quad (13)$$

본 연구에서는 전체 인 농도가 n_e 점 이상 일 때는 전자농도를 일정하게 $n = n_s$ 로 두었고, 그 이하일 때는 전자농도를 전체 인 불순물 농도와 같다고 가정하였다.

3.5 변형으로 인한 에너지 갭 감소효과

고농도 인 확산에서는 규소보다 정사면체 공유 반지름이 적은 인의 부정합에 의해 규소격자에서 변형이 발생한다. 이 변형으로 인하여 에너지 감소가 발생하고 이효과는 지체된 인 확산의 주요한 원인이 된다.

Fair 모델에 의하면 이 에너지 갭 감소는 다음으로 표현된다.¹⁴⁾

$$\Delta E_g = -1.845 * 10^{-22} * [C_s - CD(T)] \text{ (eV)}$$

$$CD(T) = \frac{2.43 * 10^{26}}{[T(^{\circ}C)]^2} \quad (14)$$

이 에너지 갭 감소는 진성 캐리어 농도를 다음의 관계식에 의해서 유효진성 캐리어 농도 (n_{ie})로 변환시킨다.

$$n_{ie} = n_i * \exp\left(-\frac{\Delta E_g}{KT}\right) \quad (15)$$

4. 수학적 모델

4.1 확산 방정식의 정규화

확산 방정식과 확산계수를 정의하기 위한 여러 가지 인자와 변수들은 방정식을 간단히 하고 컴퓨터 계산상의 Overflow을 방지하기 위하여 표 1에 나타난 바와 같은 정규화 인자들에 의해 무차원항으로 정규화한다.

Table. 1 List of normalization factors

Variables	Normalization variables and Parameters	Normalization factors
Coordinate	AB, BC, AE, X, Y	Intrinsic Debye length (DIL)
Diffusivity	D	Intrinsic total diffusivity (DNORM)
Energy	$E_g, \Delta E_g, \Delta E$	$KT = K * T$
Time	Time	$DIL^2 / DNORM$

Where $DIL = \left[\frac{\epsilon_s * K * T}{q * n_i} \right]^{1/2}$

$$DNORM = D_i^0 + D_i^- + D_i^+$$

4.2 확산 방정식의 선형화

2차원 공간에서 확산 제2법칙의 해를 수

치해석적으로 구하기 위하여 이 확산에 대한 미분 방정식은 정규화된 다음, 유한 차분법에 의해 선형화 된다. 차분법을 적용하

기 위한 격자(Mesh)와 점(Node)에 대한 모델은 그림 2에 나타내었다. 이 확산 방정식의 우변에 있는 공간좌표에 대한 2차 미분에 대해서는 중심차분을 이용하고, 좌변에 있는 시간 미분에 대해서는 전진차분을

$$\begin{aligned} \nabla^2 C^N = & \\ & \frac{D_{i+(1/2),j}(C_{i+1,j}^N - C_{i,j}^N) / h_i - D_{i-(1/2),j}(C_{i,j}^N - C_{i-1,j}^N) / h_{i-1}}{H} \\ & + \frac{D_{i,j+(1/2)}(C_{i,j+1}^N - C_{i,j}^N) / g_i - D_{i,j-(1/2)}(C_{i,j}^N - C_{i,j-1}^N) / g_{j-1}}{G} \end{aligned}$$

여기서, C^N 은 N 번째 시간간격 즉, $N * \Delta t$ 시간의 해를 의미하며, G 와 H 는 다음으로 표현된다.

$$G = \frac{g_i + g_{j-1}}{2}$$

$$H = \frac{h_i + h_{i-1}}{2}$$

확산이나 열전달에 대한 차분식은 일반적으로 다음과 같이 표현되는데,

$$\frac{C_{i,j}^{N+1} - C_{i,j}^N}{\Delta t} = \theta (\nabla^2 C^{N+1}) + (1 - \theta) \nabla^2 C^N \quad (16)$$

만약, θ 가 1이면 완전한 Implicit 법이고, θ 가 0이면 완전한 Explicit법인데, 완전한 Implicit 법이 시간간격(Δt)의 선택법에 관계없이 수렴이 보장된다. 본 연구에서도 수렴보장을 위해 완전한 Implicit 법을 이용하였다. 백터점 (예, $i+(1/2)$, j 점)에서 내삽법으로 근사화한 확산계수는 다음과 같이 표현된다.

$$D_{i+(1/2),j} = \frac{D_{i,j} + D_{i+1,j}}{2} \quad (17)$$

θ 가 1인 완전한 Implicit 법으로 확산 제

적용하였다.¹⁵⁾ 원자유속(Flux)을 계산하기 위한 백터점의 확산계수는 양쪽점의 확산계수 값을 내삽법에 의해 근사화하여 구하였다. 확산 방정식의 우변에 대한 차분 표현은 다음과 같다.

2법칙의 미분 방정식을 유한 차분화하고 $(N+1) * \Delta t$ 시간에 대한 유한 차분식을 정리하면 다음 식과 같은 선형식을 얻을 수 있다.

$$a_{i,j} C_{i,j-1}^{N+1} + b_{i,j} C_{i-1,j}^{N+1} + c_{i,j} C_{i,j}^{N+1} + d_{i,j} C_{i+1,j}^{N+1} + e_{i,j} C_{i,j+1}^{N+1} = p_{i,j} \quad (18)$$

$$a_{i,j} = - \frac{D_{i,j(1/2)}}{G * g_{j-1}}$$

$$b_{i,j} = - \frac{D_{i(1/2),j}}{H * h_{i-1}}$$

$$d_{i,j} = - \frac{D_{i+(1/2),j}}{H * h_i}$$

$$e_{i,j} = - \frac{D_{i,j+(1/2)}}{G * g_i}$$

$$c_{i,j} = - (a_{i,j} + b_{i,j} + d_{i,j} + e_{i,j}) + (1 / \Delta t)$$

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

식 (18)을 확산 모델하려는 2차원 공간에 설정한 격자점(Mesh point)들 중 경계조건에 의해 그 해를 미리 알고 있는 점들을 제외한 모든 격자점에 대해 적용하면 다음과 같은 행렬 표현식을 얻을 수 있다.

$$M * C = P$$

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 Δt 에 의해 구할 수 있는 값으로 Pertinent vector라 한다.

4.3 경계조건과 격자 선정

본 연구에서 사용한 물리적인 구조 모델은 그림 3과 같으며, 경계조건은 다음과 같다.

(1) AB 대칭면을 따라서는 $\frac{\partial C}{\partial X} = 0$ 이다.

(2) AE (Open window)에서는

(i) 예비석출 공정일 때는 표면농도가 일정하다.

(ii) 주입 공정일 때는

$$\frac{\partial C}{\partial Y} = 0 \text{ 이다.}$$

(3) 산화물 마스크와 접하고 있는 면(ED)에서는

$$\frac{\partial C}{\partial X} = 0 \text{ 이다.}$$

(4) BC, CD 면은 확산층으로부터의 영향이 없다고 가정하여 $C=0$ 이다.

격자 선정은 도핑된 불순물 농도 기울기가 큰 영역에서는 격자 간격을 좁게 선정하였고, 작은 영역에서는 격자 간격을 넓게 택하였으며 대표적인 격자점수는 $33*45$ 이었다.

4.4 프로그램 유통도

프로그램에 대한 유통도는 그림 4에 나타내었으며, 먼저 Input data를 Block data에서 읽은 후, 공정순서를 선택함과 동시에 확산시간과 온도를 정한다. 그런 후에 선형화된 확산 방정식을 풀기 위한 변수들을 계산한 후, 방정식을 간단히 하고 Overflow

을 방지하기 위하여 모든 변수들을 정규화시킨다. 정규화된 방정식의 각 항의 계수를 계산한 후 해법 프로그램인 Stone의 SIP법¹⁶⁾을 이용하여 도핑된 불순물 농도 분포를 계산한다.

5. 결과 및 고찰

예비석출 확산공정은 일반적으로 공정종류에 따라 1000~1200℃ 온도범위에서 상대적으로 짧은 시간 동안에 행하여져 규소 표면에 불순물을 석출하고 주로 그 불순물 양을 조절하는 공정이다. 반면에 주입 확산공정은 표면에 석출된 불순물 양을 적당한 깊이까지 확산시켜 확산깊이나 접합깊이를 조절하는 공정인데, 일반적으로 예비석출이 끝난 다음의 모든 공정은 주입공정에 포함되어야 한다. 본 연구에서는 모의 실험결과를 비교하기 위하여 Oh등¹²⁾의 확산실험에서 선택된 예비석출과 주입공정시의 온도와 시간을 택하여 계산하여 보았다.

5.1 인의 예비석출

인의 예비석출이나 주입공정시 주어진 온도와 시간에서 도핑된 불순물 농도분포는 봉소의 농도분포와는 매우 다른 경향을 나타낸다.

그림 5는 인을 950℃에서 30분간 예비석출시켰을때 Y방향의 최종 농도분포를 Oh¹²⁾ 등의 실험치 및 시뮬레이션 결과(DIFSIM)와 함께 1차원적으로 비교 도시한 그림이다. DIFS2D의 시뮬레이션 결과가 실험치에 음의 편차를 나타내고 있는데 반해 DIFSIM의 시뮬레이션 결과가 양의 편차를 나타내고 있다. 그러나 음의 편차가 양의 편차보다 작기 때문에 DIFS2D의 모델이 더 근사하다. DIFS2D의 시뮬레이션 결과의 음의 편차 이유로서는 표면영역에서의 이온화한 인의 농도(전자농도)를 일정하게 가정한 모델과 전이영역에서의 비례계수(K)에 대한

덜 정확한 모델 때문이라고 생각한다. 그림 6은 950℃에서 예비석출하였을 때의 농도분포를 2차원적으로 도시한 것이다. 그림 7은 1000℃에서 60분간 예비석출시킨 후의 농도 분포를 2차원적으로 도시한 것이다.

5.2 인의 주입

그림 8은 950℃에서 30분간 예비석출시킨 후, 1100℃에서 20분간 주입했을 때 Y방향의 농도분포를 $Oh_{등}$ 의 실험치 및 시물레이션 결과와 함께 1차원적으로 도시한 그림이다. DIFS2D의 시물레이션 결과를 실험치와 비교할 때 표면영역에서는 매우 근사하지만, 꼬리영역에서는 상당한 오차가 발생한다. 그러나 전체적으로 DIFSIM의 시물레이션 결과보다 더 근사하다. 꼬리영역에서의 편차 원인으로서는 확산의 온도가 1050℃이상에서는 전이영역이 존재하지 않기 때문에, 예비석출공정시 표면영역에서의 이온화한 인의 농도를 일정하게 둔 모델과 전이영역에서의 비례계수(K)의 오차가 꼬리영역에서의 큰 오차를 유발시킨다고 생각한다. 그림 9와 10은 950℃에서 30분간 인을 예비석출 시킨 후 1000℃에서 20분간, 1100℃에서 20분으로 주입공정을 했을 때의 농도분포를 2차원으로 도시한 것이다. 그림 11은 1000℃에서 60분간 예비석출 후 1050℃에서 15분간 주입공정후의 농도 분포를 2차원적으로 도시한 그림이다. 그림 6과 7에서 표면영역이 나타나지 않은 것은 농도분포를 도시하기 위하여 격자를 선택하였기 때문이다. 그리고 그림 5, 6, 7과 11에서는 전이영역이 존재하지만, 그림 8, 10에서는 전이영역이 존재하지 않는 것은 1050℃이상에서는 전이영역이 존재하지 않는다고 Fair와 Tsai의 모델에서 알려져 있기 때문이다.

6. 결 론

본 연구에서는 규소직접회로에 일반적으

로 쓰이는 인의 불활성 분위기나 질소 분위기하에서 예비석출과 주입 공정시, 도핑된 2차원 농도분포를 예측할 수 있는 수치해석 프로그램 (DIFS2D)을 개발하였다.

인의 확산계수의 기본적인 기구로서는 공공기구를 사용하였으며, Fair와 Tsai 모델을 사용했다. 특히 고농도 인의 확산에서는 규소와 인의 원자 이온 반지름의 차이로 인한 변형때문에 생기는 에너지 갭 감소효과를 고려했다. 설정한 확산계수 모델을 가지고서 확산 방정식을 선형화시켜 Stone의 SIP법을 이용하여 인의 최종농도분포를 계산하였다. 여러 가지 온도와 시간에서의 시물레이션 결과를 $Oh_{등}$ 의 실험치와 비교하여 본 결과, 상당히 가까운 시물레이션 결과를 얻을 수 있었다. 그러나 시물레이션 결과의 오차를 줄이기 위해서는 out diffusion에 대한 모델과 비례계수(K), 전체 인 불순물 농도와 이온화한 인 불순물 농도의 관계식에 대한 정확한 모델이 고려되어야 할 것으로 사료된다.

7. 참고문헌

1. 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. R. A. Colclaser: Microelectronics Processing and Device Design Wiley, NY, 1980.
5. C.D. Thurmond: J. Electrochem. Soc., 122, 1133(1975).
6. D.L. Kendall and D.B. De Vries: Diffusion in Silicon, NY, 1967.
7. D. Shaw: Phys. Stat. Sol. (b)72, 11 (1975).
8. S.P. Gaur and D.H. Navor: IEEE Trans. Electron Device, 23,50(1976).
9. E. Tannenbaum: Solid-State Electron..

- 2, 123(1961).
10. J. C. C. Tsai: Proc. IEEE, 57, 1499 (1969).
 11. R. F. Peart and R. C. Newman: Radiation Damage and Defects in Semiconductors, J. E. Whitehouse, Editor, p.170, Institute of Physics, London(1973).
 12. R. B. Fair and j. C. C. Tsai: J. Electrochem. Soc., 124, 1107(1977).
 13. C. P. Ho and S. E. Hansen: Suprem III-A Program for Integrated Circuit Process Modelling and Simulation, sel 83-001, Stanford Electronics LA3, Stanford University, July, 1984.
 14. R. B. Fair: j. Appl. Phys., Vol.50 (2), 860(1979).
 15. 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.
 16. H. L. Stone: Siam J. Numer. Anal. Vol. 5, No. 3, 1968.

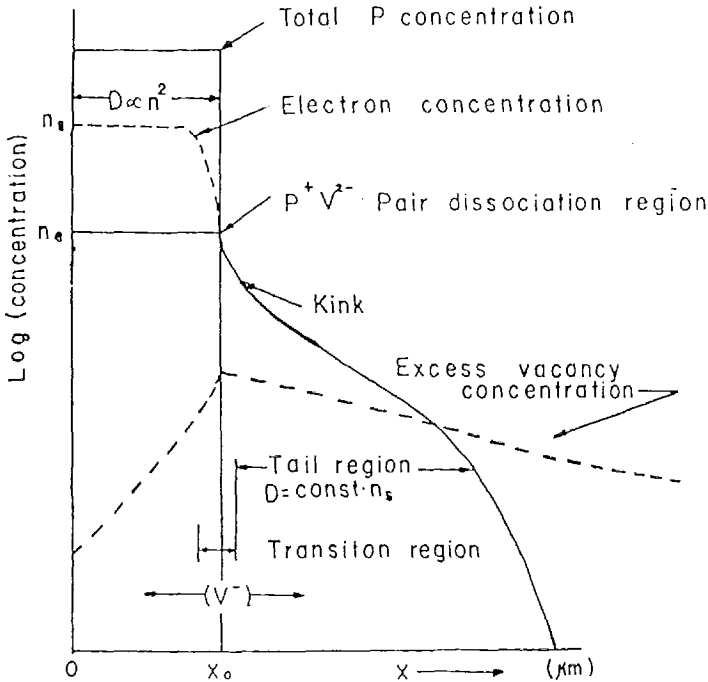


Fig. 1. Idealized phosphorus doping profile in silicon

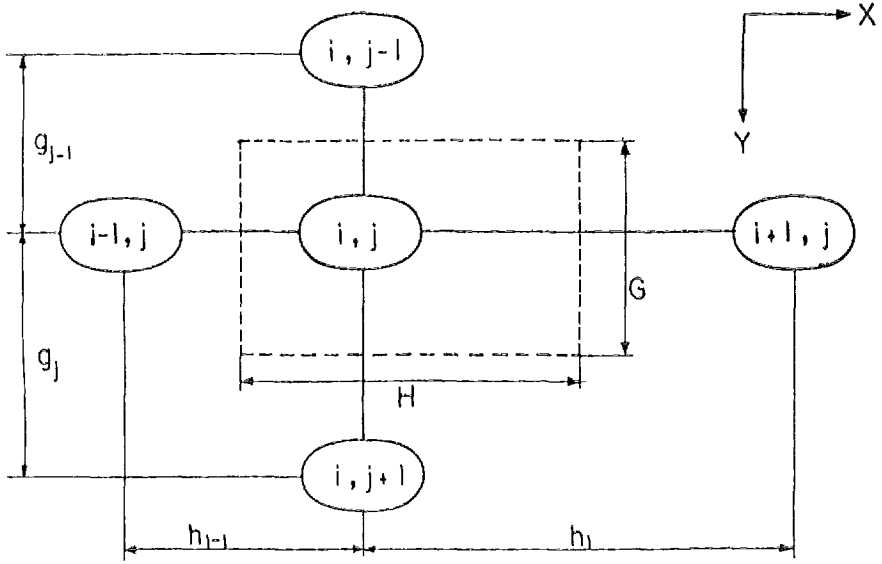


Fig. 2. Typical nodes for two dimensional finite difference equation formulation

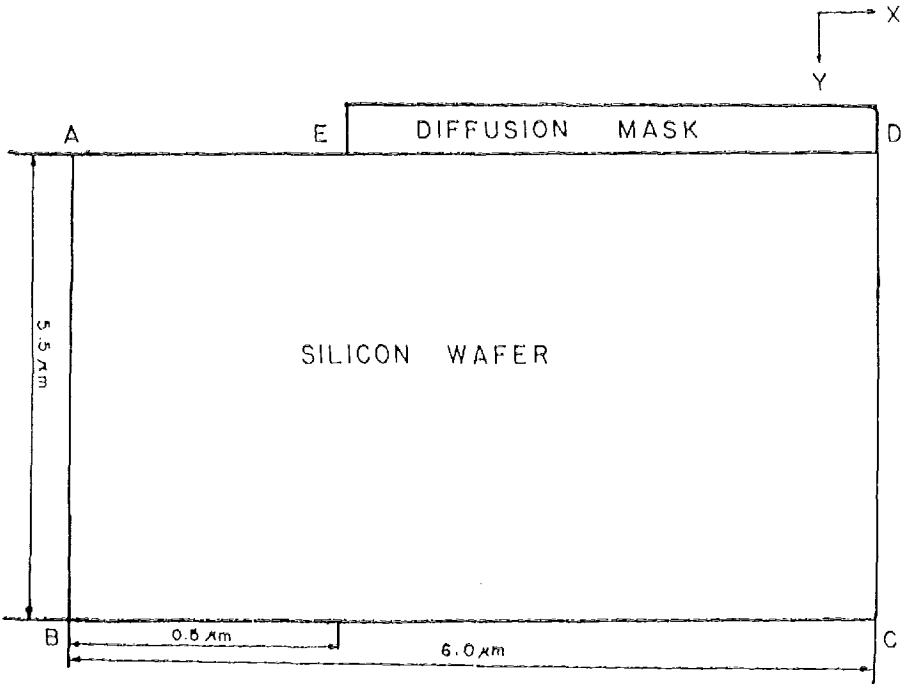


Fig. 3. Physical structure model

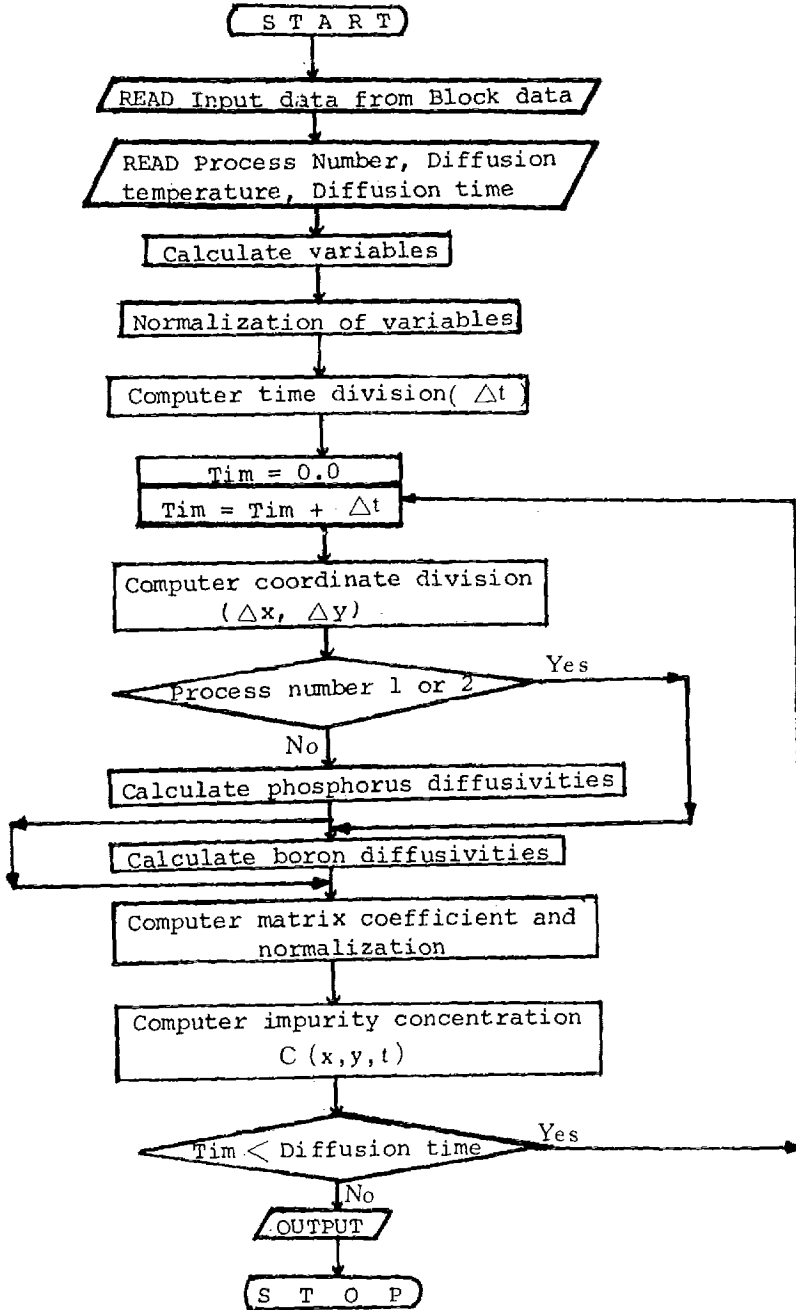


Fig. 4. Flow chart of programme DIFS2D

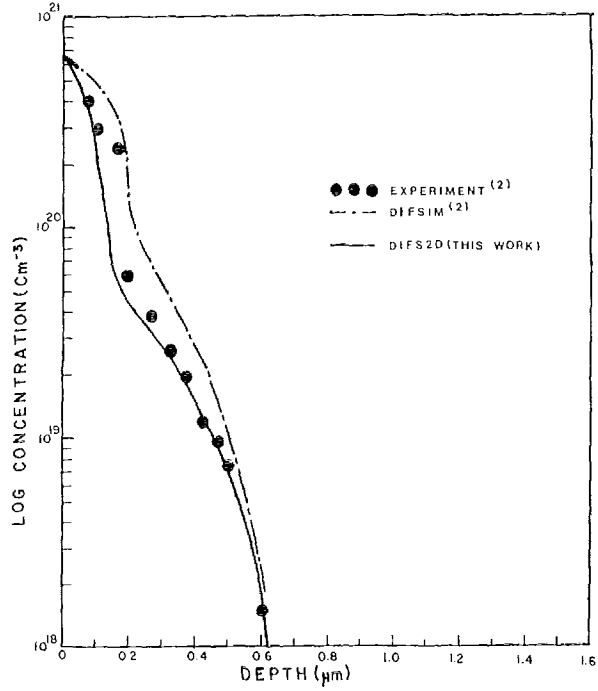


Fig. 5. Comparison of simulation and experimental results for the predeposition of phosphorus at 950°C, 30 Min.

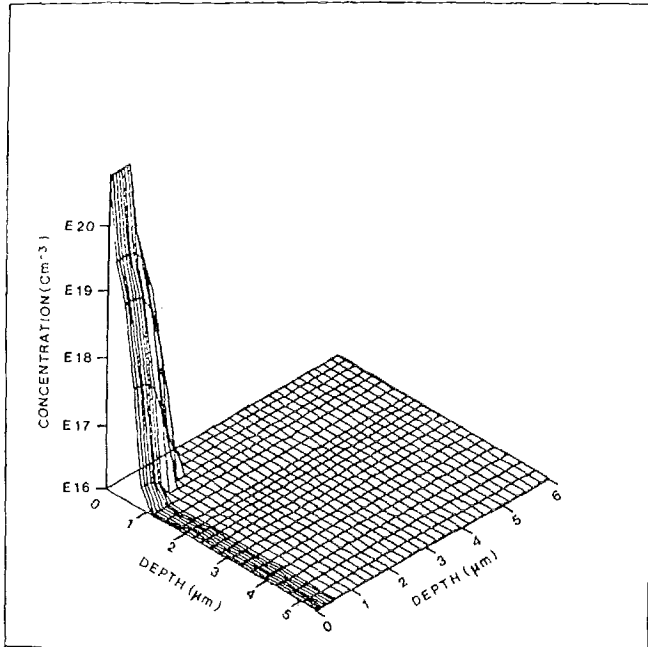


Fig. 6. Two dimensional profile of phosphorus due to predeposition at 950°C, 30 Min

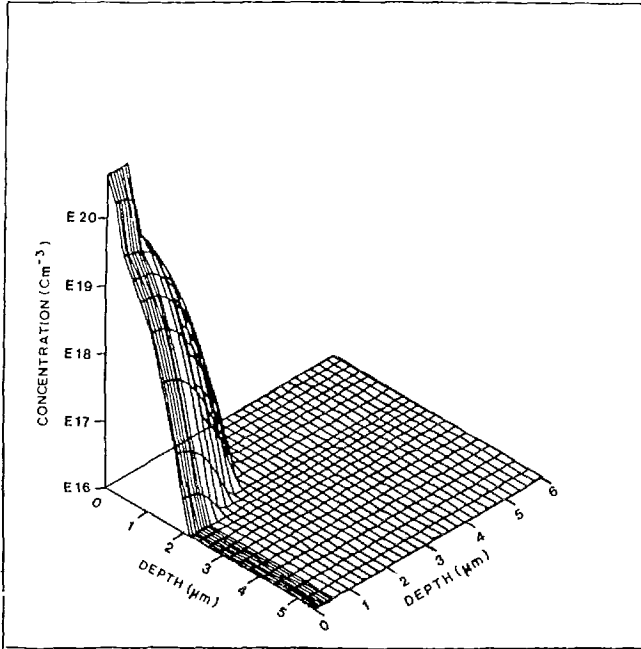


Fig. 7. Two dimensional profile of phosphorus due to predeposition at 1000°C, 60 Min.

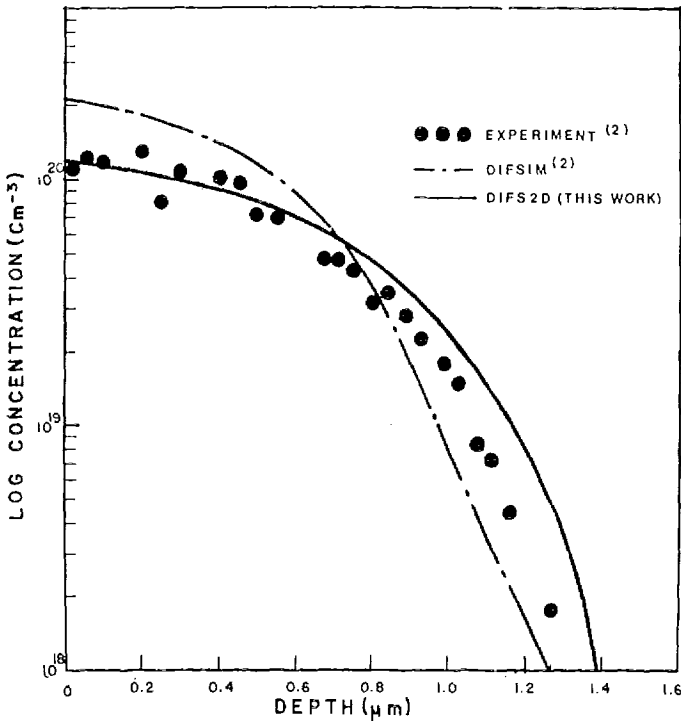


Fig. 8. Comparison of simulation and experimental results for the drive - in of phosphorus at 1100°C, 20 Min. after 950°C, 30 Min.

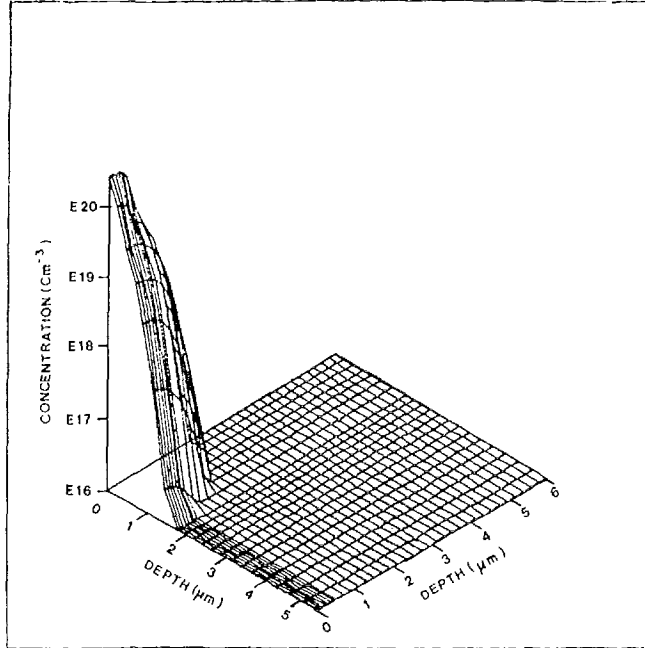


Fig. 9. Two dimensional profile of phosphorus due to drive - in at 1000°C. 20 Min after predeposition at 950°C. 30 Min.

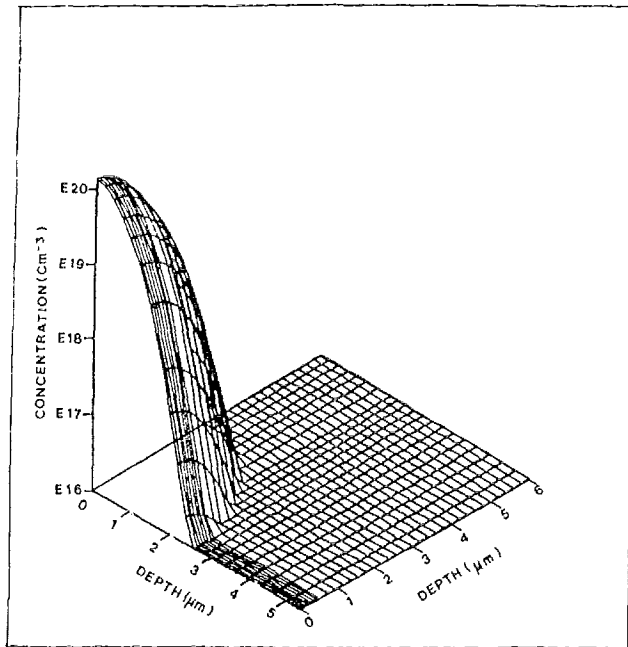


Fig. 10. Two dimensional profile of phosphorus due to drive - in at 1100°C. 20 Min after predeposition at 950°C. 30 Min.

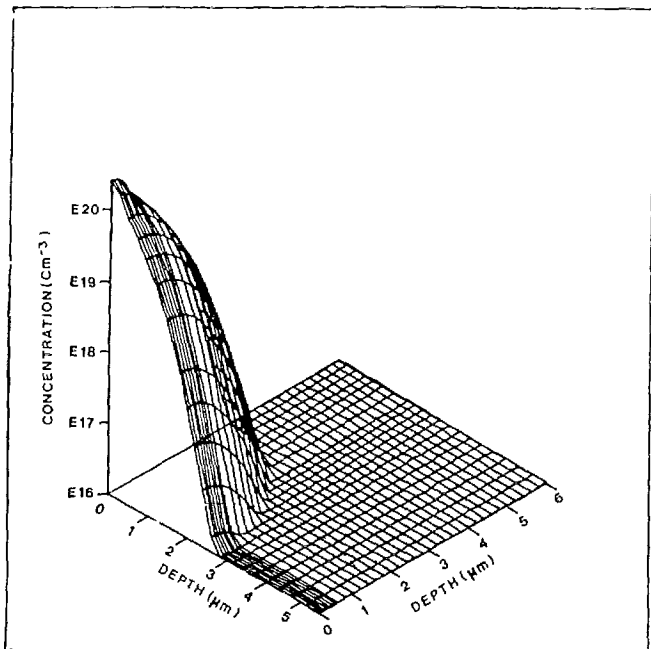


Fig. 11. Two dimensional profile of phosphorus due to drive - in at 1050°C, 15 Min. after predeposition at 1000°C, 60 Min.