

경계요소법을 이용한 실리콘내에서 2차원 불순물 분포의 산출

김찬규 황호정

중앙대학교 대학원 반도체공학전공

A production of two-dimensional impurity using boundary element method in silicon

Chan Gai Kim Ho Jung Hwang

Dept. of Electronics Chung Ang Univ.

Abstract

A two-dimensional numerical simulation program is presented which enables the concentration of impurity in Silicon to be calculated. The numerical algorithm used is based on the boundary element method.

반도체 소자를 제작 하기 위한 1차원인 공정이 불순물에 대한 doping 과정이다. 이 과정을 여러 제약 조건이 많은 불확실한 model 보다 Computer 를 이용한 수치적 model 을 실행 함으로서 시간과 비용을 절약하면서 정확하게 불순물 분포를 예측 할 수 있다. 본 논문에서는 새로운 수치적인 방법인 BEM을 제시하였다. 이 방법은 기존의 수치 적인 방법 보다 요소 분할이 간편하고, 절점의 수가 요소 차원 등에 있어 장점을 갖는다.

2 불순물의 확산에 대한 물리적 고찰

(I) 불순물의 확산

1) Field Enhancement

$$F = -D \frac{\partial c}{\partial x} \quad (1)$$

F : flux C : 불순물 농도 D : 확산계수

(II) 식에 이온화된 불순물에 의한 전계의 영향을 고려 하면

$$F = -D \frac{\partial c}{\partial x} + \mu n e \quad (2)$$

( $\mu$  : mobility  $e$  : 전계)

이상을 정리하면

$$Deff = D \left( 1 + \frac{c}{\sqrt{c^2 + 4n_i^2}} \right) \quad (3)$$

$$\beta = \left( 1 + \frac{c}{\sqrt{c^2 + 4n_i^2}} \right)$$

$\beta$  : field-enhancement factor

$\beta$ 의 최대 값은 2이다. 그러므로 field에 의해 확산계수는

최대 2배까지 증가한다.

2) Vacancy Enhancement

확산계수는 Vacancy charge의 상태 에 따라 다음 같이 표현 될 수 있다.

intrinsic diffusivity

$$D_i = D_i^0 + D_i^+ + D_i^- + D_i^{2-} \quad (4)$$

$D_i^0$  : natural vacancy일 때 확산계수

$D_i^+$  : positively charged vacancy일 때 확산계수

$D_i^-$  : negatively charged vacancy일 때 확산계수

$D_i^{2-}$  : doubly negatively charged vacancy일 때 확산계수

extrinsic diffusivity

$$D = D_i^0 \frac{[V^0]}{[V^0]_i} + D_i^+ \frac{[V^+]}{[V^+]_i} + D_i^- \frac{[V^-]}{[V^-]_i} + D_i^{2-} \frac{[V^{2-}]}{[V^{2-}]_i} \quad (5)$$

이온화된 vacancy ratio는 mass action의 법칙을 이용해서 결정할 수 있다.

$V^+$  인 경우

$$\frac{[V^+]}{[V^+]_i} = \frac{\beta}{n_i}$$

-r charge 상태를 가진 vacancy인 경우

$$\frac{[V^{r-}]}{[V^{r-}]_i} = \left( \frac{n}{n_i} \right)^r$$

위의 결과를 이용해서 앞의식을 다시 표현하면

$$D = D_i^0 + D_i^+ \left( \frac{\beta}{n_i} \right) + D_i^- \left( \frac{n}{n_i} \right) + D_i^{2-} \left( \frac{n}{n_i} \right)^2 \quad (6)$$

field enhancement 와 vacancy enhancement 을 모두 고려한 effective 확산계수는 다음과 같이 표현된다.

$$Deff = \beta \left[ D_i^0 + D_i^+ \left( \frac{\beta}{n_i} \right) + D_i^- \left( \frac{n}{n_i} \right) + D_i^{2-} \left( \frac{n}{n_i} \right)^2 \right] \quad (7)$$

(2) 확산 방정식

Fick의 제 1 법칙은

$$F = -D \frac{\partial c}{\partial x} \quad (1)$$

Fick의 제2법칙은

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial c}{\partial x} D \frac{\partial c}{\partial x} \quad (8)$$

(8) 식을 확산 방정식이라 한다.

3. Model의 수치 해석

(1) 경계 조건

Fig.1에서 보인 device는 HD를 축으로 대칭이므로 해석할 때는 한쪽면 ABCDHA만을 고려하였다. 그런데 여기서 불순물을 주입하는 각 과정에서 필요한 경계 조건을 구할 수 있다.

reflecting boundary이라 가정하면 predeposition process에서 경계 ABCD에서는 Neumann 조건을 만족하고 경계 HA에서는 Dirichlet 조건을 만족한다.

또한 drive-in process에서는 전경계 ABCDHA가 Neumann 조건을 만족함을 알 수 있다. 여기서 구한 경계 조건은 BEM을 해석하는 경계 조건으로 도입된다.

(2) BEM을 이산화

Time Marching

확산 방정식에서 변수 C를 u로 대체하여 확산 방정식을 쓰면

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \nabla^2 u \quad (9) \quad D = \text{상수}$$

Green 정리를 시행하면 time 구간  $t_0 \leq t \leq t_F$

$$\begin{aligned} & \int_{t_0}^{t_F} \int_{\Omega} [u(p, t) \nabla^2 u^*(p', t_F, t) \\ & - u^*(p, p', t_F, t) \nabla^2 u(p, t)] d\Omega dt \\ & = \int_{t_0}^{t_F} \int_{\Gamma} [u(Q, t) q^*(Q, p', t_F, t) \\ & - u^*(Q, p', t_F, t) q(Q, t)] d\Gamma dt \quad (10) \\ & u^*(x, y, t) = \frac{1}{4K\pi} \exp\left[-\frac{r^2}{4K}\right] \end{aligned}$$

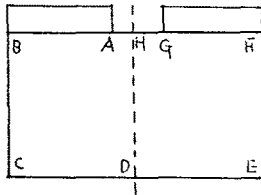


Fig.1 device model

시간 구간을  $t_0$ 에서  $t_F$ 까지를 F개로 이산화시키고 각 구간에서 u와 q는 일정하다 가정한다. 시간구간  $t_{F-1} \leq t \leq t_F$  적분을 구하면

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} u_F(Q', t_F) + \frac{1}{2\pi} \sum_{j=1}^F \left\{ \frac{1}{r} \left[ \exp\left[-\frac{r^2}{4D(t_F - t_j)}\right] \right. \right. \\ & \left. \left. - \exp\left[-\frac{r^2}{4D(t_F - t_{j-1})}\right] \right] \frac{\partial r}{\partial n} u_j^* ds \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & = \frac{1}{4\pi} \sum_{j=1}^F \left\{ [E_i(a_j) - E_i(a_{j-1})] q_j^* ds \right. \\ & \left. + \frac{1}{4\pi D(t_F - t_0)} \int_{\Omega} u_0 \exp\left[-\frac{r^2}{4D(t_F - t_0)}\right] d\Omega \right. \end{aligned} \quad (11)$$

또한 경계를 N개의 element로 이산화시키고 각 element

에서  $u_j$ 와  $q_j$ 값이 일정하다면

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} u_F^i = \sum_{j=1}^N \sum_{j=1}^F (h_{ij}^i u_j^i + g_{ij}^i q_j^i) \\ & + \frac{1}{4\pi D(t_F - t_0)} \int_{\Omega} \exp\left[-\frac{r^2}{4D(t_F - t_0)}\right] u_0 d\Omega \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} h_{ij}^i & = -\frac{1}{2\pi} \int_{C_j} \frac{1}{r} \left[ \exp\left[-\frac{r^2}{4D(t_F - t_j)}\right] \right. \\ & \left. - \exp\left[-\frac{r^2}{4D(t_F - t_{j-1})}\right] \right] \frac{\partial r}{\partial n} ds \quad (13) \end{aligned}$$

$$g_{ij}^i = \frac{1}{4\pi} \int_{C_j} [E_i(a_j) - E_i(a_{j-1})] ds \quad (14)$$

그런데 predeposition 과정의 경우에 초기의 내점값  $u_0$ 은 영(0)이 된다.

$$\frac{1}{2} u_F^i = \sum_{j=1}^N \sum_{j=1}^F (h_{ij}^i u_j^i + g_{ij}^i q_j^i) \quad (15)$$

matrix 형식으로 쓰면

$$H_j u_j = G_j q_j \quad (16)$$

이상에서 계수를 구하고 이를 이용해서 미지 경계값  $u_j, q_j$ 를 구할 수 있다. 영역의 내점의 값은 경계 적분 방정식에서 얻은 경계치 값을 다음식에 대입하여 얻을 수 있다.

$$u_F^i = \sum_{j=1}^N \sum_{j=1}^F (-h_{ij}^i u_j^i + g_{ij}^i q_j^i) \quad (17)$$

이 식은 predeposition 과정에서 영역내의 불순물 농도 값을 구하는 해가 된다. drive-in 과정에서 불순물 농도를 구해보면 drive-in 과정에서 전경계가  $q_j^i = 0$ 이므로

$$\frac{1}{2} u_F^i = \sum_{j=1}^N \sum_{j=1}^F (h_{ij}^i u_j^i) + \int u_0 u^* d\Omega \quad (18)$$

$$\int u_0 u^* d\Omega = \sum_{j=1}^N (h_{ij}^0 u_j^0 + g_{ij}^0 q_j^0) + \frac{1}{2} u_0(Q') \quad (19)$$

$$h_{ij}^0 = \frac{1}{2\pi} \int_{C_j} \frac{1}{r} \exp\left[-\frac{r^2}{4D\alpha}\right] \frac{\partial r}{\partial n} ds \quad (20)$$

$$g_{ij}^0 = -\frac{1}{4\pi} \int_{C_j} E_i\left[\frac{r^2}{4D\alpha}\right] ds \quad (21)$$

matrix 형태로 고치면

$$H_j u_j = H_0 u_0 + G_0 q_0 \quad (22)$$

이상에서 계수를 구하고 이를 이용해서 미지의 경계값을 구한다. drive-in 과정에서 내점값은 다음식에 대입하여 얻을 수 있다.

$$u_p^i = \sum_{j=1}^N \sum_{m=1}^P (-h_{ij}^p u_j^m) + \sum_{q=1}^M (h_{ij}^q u_0^q + g_{ij}^q q_0^q) \quad (23)$$

이 식은 drive-in 과정에서 영역내의 불순물의 농도값을 구하는 해가 된다. 이상의 이산화 과정을 통한 실리콘내의 불순물의 농도값을 computer programing에 의해 그 해를 구할 수 있게 된다.

(3) 결과

Fig 2에 predeposition 과정에서 구한 불순물의 분포와 Fig. 3에 drive-in 과정에서의 불순물의 분포를 나타내었다. 또한 근사화된 complementary error 분포와 gauss 분포를 predeposition 과정과 drive-in 과정의 불순물의 분포를 깊이에 따른 1차원으로 각각 비교하여 Fig 4.에 나타내었다.

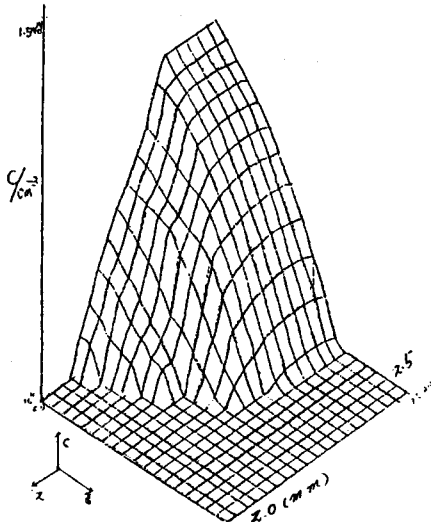


Fig 2 predeposition 과정

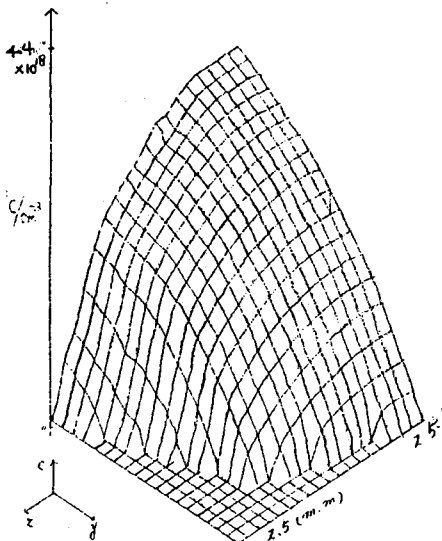


Fig. 3 drive-in 과정

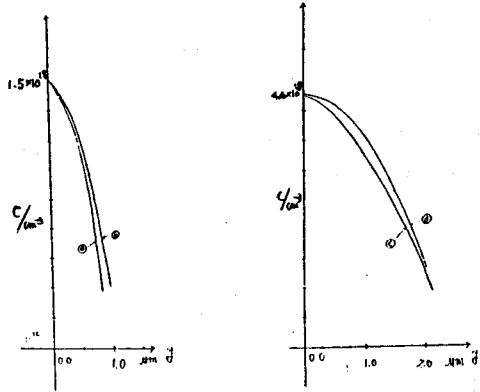


Fig.4

- Ⓐ predeposition process    Ⓒ drive-in
- Ⓑ complementary error    Ⓓ gauss

4. 결론

본 논문에서 적용한 BEM은 요소 분할이 간편하고 node가 현저히 감소함을 확인 하였다. 또한 선형적인 확산 방정식을 BEM으로 computer simulation 결과와 gauss 분포와 complementary error 분포를 비교한 결과 아주 유사한 분포를 갖음을 확인하였다.

References

1. A.Buonomo and C.Di Bello, " Two-dimensional numerical analysis of impurity atom numerical in semiconductor," IEEE Tran.Electron Device, vol.ED-30, pp.857-860, July 1983.
2. A.Buonomo and C.Di Bello, "Nonlinear two-dimensional impurity in semiconductor :A Quasi-linear numerical analysis ,"IEEE Electron Device, vol. ED-31, pp. 1708-1713, Dec.1984.
3. A.S.Grove, "Physics and technology of Semiconductor Device," New York,1967.
4. S.K Gandhi, "VLSI fabrication principle," New York,1983
5. C.A.Brebbia J.C.F.Telles L.C.Wrobel "Boundary element techniques theory and Application in engineering," Springer-Verlag Berlin Heideberg New York Tokyo 1984.
6. K.A.Salsburg and H.H Hansen, "FEDSS-Finite element diffusion simulator system," IEEE Trans. Electron Device, vol.ED-30, pp.1004-1011 Sept.1983