

SiGe에 이온 주입과 열처리에 의한 불순물 분포의 연구

정원채^a

경기대학교 전자공학과

A Study of Dopant Distribution in SiGe Using Ion Implantation and Thermal Annealing

Won-Chae Jung^a

Department of Electronic Engineering, Kyonggi University, Suwon 16227, Korea

(Received June 29, 2018; Revised July 16, 2017; Accepted July 18, 2018)

Abstract: For the investigation of dopant profiles in implanted $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, the implanted B and As profiles are measured using SIMS (secondary ion mass spectrometry). The fundamental ion-solid interactions of implantation in $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ are discussed and explained using SRIM, UT-marlowe, and T-dyn programs. The annealed simulation profiles are also analyzed and compared with experimental data. In comparison with the SIMS data, the boron simulation results show 8% deviations of R_p and 1.8% deviations of ΔR_p owing to relatively small lattice strain and relaxation on the sample surface. In comparison with the SIMS data, the simulation results show 4.7% deviations of R_p and 8.1% deviations of ΔR_p in the arsenic implanted $\text{Si}_{0.2}\text{Ge}_{0.8}$ layer and 8.5% deviations of R_p and 38% deviations of ΔR_p in the $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ layer. An analytical method for obtaining the dopant profile is proposed and also compared with experimental and simulation data herein. For the high-speed CMOSFET (complementary metal oxide semiconductor field effect transistor) and HBT (heterojunction bipolar transistor), the study of dopant profiles in the $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ layer becomes more important for accurate device scaling and fabrication technologies.

Keywords: Ion implantation, Sputtering, SiGe, SIMS, Diffusion, Computer simulation

1. 서론

기존에 사용되는 실리콘보다 게르마늄이 혼합된 반도체 물질인 SiGe이 더 높은 전자, 정공의 이동도 때문에 고주파집적회로 및 고속전자회로제작용 반도체칩 제작에 활용도가 더 높다. SiGe을 사용함으로써 특히 집적회로용 CMOSFET 제작 [1-5]에서 특히 PMOSFET의 속도가 현저하게 개선된다. 또한 더 빠른 switching 속

도 때문에 이종접합 BJT (bipolar junction transistor)의 제작 [6-10]에도 사용된다. 따라서 본 연구에서는 PMOSFET의 제작을 위한 도핑으로써 B를 이온주입하고 NMOSFET의 제작을 위한 도핑으로써 heavy 이온인 As를 SiGe에 이온주입 하여 dose 변화에 따른 sputtering 효과와 불순물의 분포를 조사하고자 한다. 실리콘-게르마늄은 IV-IV족의 화합물 반도체이고 실리콘에 비해서 더 높은 이동도와 dopant solubility를 나타내고 있다. SiGe의 뛰어난 특성은 Ge의 조성비에 따른 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 물질이 다양한 에너지 band gap 구조와 물리적인 특성을 자유롭게 변화시킬 수가 있다. 실온에서 실리콘은 1.1 eV의 에너지 band gap인 반면에 게르마늄은 0.67 eV를 나타내고 있다. Ge의 격자상수는 실리콘에 비해서 4.2% 더 크다. 실리콘기판에

a. Corresponding author; wjung@kgu.ac.kr

서보다 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 의 기판은 다양한 이종접합 구조의 소자 제작도 가능하다. 또한 고성능의 CMOSFET와 광전 소자 제작을 위해서 strained Si/relaxed SiGe 다층 구조의 응용도 응용되고 있다 [1-5]. $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 에서 결정의 격자상수에 대한 model을 수식으로 나타내면 식 (1)과 같다 [6]. 단위는 Å이다.

$$a(x) = 0.02733x^2 + 0.1992x + 5.431 \quad (1)$$

또한 농도는 다음과 같이 나타낼 수가 있다. $C(x) = [2/a(x)]^3 \times 10^{24}$ atoms/cm³, 여기서 $a(x)$ 는 Ge의 성분이 추가된 경우에 격자상수를 나타내고 있다. Ge 때문에 변형된 원자밀도는 다음의 식 (2)와 같이 나타내어진다. 이때에 단위는 amu $\times 10^6$ kg/m³이다.

$$\rho(x) = C(x)[(1-x)M_{\text{Si}} + xM_{\text{Ge}}] \quad (2)$$

Strained 실리콘에서 격자상수는 다음의 구간범위 내로 제한된다. $a_{\perp}(x) < a_{\text{Si}} < a_{\parallel}(x)$ 의 범위 안에 있게 된다. Strained 실리콘에서 strained와 unstrained에서 차이는 실제로 매우 적다는 것이 나타나 있다 [7-12]. NMOS에서 Ge 누설전류가 Si보다 약 4배나 더 크기 때문에 Ge에서 doping profile이 실리콘에서 보다 더 큰 nuclear and electronic stopping power 때문에 얇은 doping 분포를 나타내게 된다. SiGe의 격자상수는 Ge의 조성비에 따라서 변하게 된다. $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 결정은 이완(relaxed)과 압축(strained)으로 나타낼 수 있다. 격자상수의 상대적인 변화는 식 (3)과 같이 나타내어진다 [12]. 여기서 x 는 Ge의 mole fraction이다.

$$\varepsilon = \frac{a_{\text{SiGe}} - a_{\text{Si}}}{a_{\text{Si}}} = 0.00501x^2 + 0.03675x \quad (3)$$

평면과 수직 격자상수는 a_{\parallel} 와 a_{\perp} 로 각각 나타내어진다.

$$a_{\parallel} = a_{\perp}, a_{\perp} = a_{\text{Si}}(1 + k\varepsilon), \quad (4)$$

$$k = 1 + \frac{2C_{12}}{C_{11}} = 1.75$$

여기서 C_{11} , C_{12} 는 실온에서 실리콘의 탄성계수이다. 완전히 이완된 격자상수는 a_{\parallel} 과 a_{\perp} 가 같은 경우이다. 즉 $a_{\parallel} = a_{\perp} = a_{\text{Si}}(1 + \varepsilon)$ 인 경우이다.

Epitaxy 기술을 통해서 나타난 압축(strained)된 SiGe은 MOS transistor의 캐리어 이동도를 증가시킨다. Si-SiGe 이종접합구조를 통하여 다양한 소자들의 특성을 최적화시킬 수가 있다. 또한 SiGe층 위에 실리콘을 epi층으로 성장시키면, 어떤 두께까지 압축(strained)층을 형성할 수가 있다. 비슷한 방법으로 strained SiGe층도 성장시킬 수가 있다. Strained-Si/relaxed-SiGe 구조는 주로 전자이동도를 향상시키는 tensile strain을 야기한다. 반면에 strained-SiGe/relaxed-Si의 구조는 정공이동도를 증가시키는 구조에 의한 compressive strain을 나타낸다. 성장된 SiGe 에피층 또는 SiGe bulk 웨이퍼는 지속적인 연구를 통하여 개선되어 왔음에도 불구하고 결함밀도, SiGe/Si의 경계면에 대한 효과가 집적회로의 CMOS 또는 다양한 전자소자에서 어떠한 영향을 미치는지, dopant의 분포에 따른 소자특성의 변화에 대한 다양한 연구가 더 많이 수행되어야 할 것으로 사료된다. 따라서 본 연구에서는 Ge의 조성비에 따른 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 의 층으로 B와 As의 이온주입에 따른 불순물의 분포를 조사하고 또한 전기적인 활성화를 위해서 열처리 후에 불순물이 확산된 분포를 나타내기 위해서 수식적인 방법을 적용한 이론적 모델링을 만들고자 한다. 불순물이 이온 주입된 분포를 나타내기 위해서 수직방향으로 range를 나타내기 위한 식들을 식 (5)~(9)에 나타내었다.

$$C(x) = C_{\text{dose}} \cdot f(x) \quad (5)$$

여기서 C_{dose} 는 이온주입량 즉 dose를 나타내고 $f(x)$ 는 규격화된 분포함수를 나타낸다. R_p 는 수직방향으로 평균 침투깊이를, ΔR_p 는 수직방향으로의 표준편차를 각각 나타낸다. γ 는 peak 농도를 중심으로 무게중심의 기울기를 의미하며 β 는 프로파일의 뾰족한 정도를 나타낸다.

$$R_p = \int_0^{\infty} x \cdot f(x) dx \quad (6)$$

$$\Delta R_p^2 = \int_0^{\infty} (x - R_p)^2 \cdot f(x) dx \quad (7)$$

$$\gamma = \frac{\int_0^{\infty} (x - R_p)^3 \cdot f(x) dx}{\Delta R_p^3} \quad (8)$$

$$\beta = \frac{\int_0^{\infty} (x - R_p)^4 \cdot f(x) dx}{\Delta R_p^4} \quad (9)$$

Dual pearson 함수로 도핑분포를 나타내는 식은 식 (10)~(12)에 각각 나타내었다.

$$C(x) = D_1 \cdot f_1(x) + D_2 \cdot f_2(x) \quad (10)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} C(x) dx = D_1 + D_2 = D \quad (11)$$

Dose ratio는 수식 12로 나타낼 수 있다.

$$Dose_{ratio} = \frac{D_1}{D_1 + D_2} \quad (12)$$

SiGe/Si의 특성에 대한 연구는 아직도 더 많이 필요한 실정이다. 또한 As의 경우는 이온주입 동안에 SiGe의 표면에 sputtering 효과를 나타낼 것이다. 이에 따른 많은 연구가 아직까지는 수행되지 못한 실정이다. 따라서 에너지와 dose rate, 이온주입 입사각의 변화에 따른 sputtering 효과를 조사하여 표면의 식각현상을 제시하고자 한다. 본 연구를 통해서 다양한 Ge의 조성비에서 열처리공정에 따른 확산계수를 구하여 dopant 재분포를 나타낼 수 있도록 컴퓨터모델링을 통한 방법을 연구하고자 한다.

2. 실험 방법

기존에 반도체 집적회로 기판으로 사용되는 실리콘대신에 이동도가 더 큰 SiGe 기판을 기준으로 하여 바이폴라 및 MOS 트랜지스터의 제작을 위해서 이온주입 공정기술로 B와 As를 doping하는 방법들에 대해서 조사한다. SRIM simulation tool [13,14]을 사용하여 SiGe 기판에서 우선적으로 이온주입 된 불순물들의 range 분포를 확인한다. B와 As가 Si_{1-x}Ge_x에 이온주입 된 경우에 SRIM 시뮬레이션에서 발췌된 전자 및 핵 정지력을 그림 1에 나타내었다. B의 경우 점선, As의 경우 실선으로 각각 나타내었다. B의 경우 S_e (electron stopping power)의 최대치는 4 MeV에서 116.2 eV/Å를 나타내었으며, S_n (nuclear stopping power)은 4.5 keV에서 8.279 eV/Å로 각각 나타났다. 또한 As의 경우

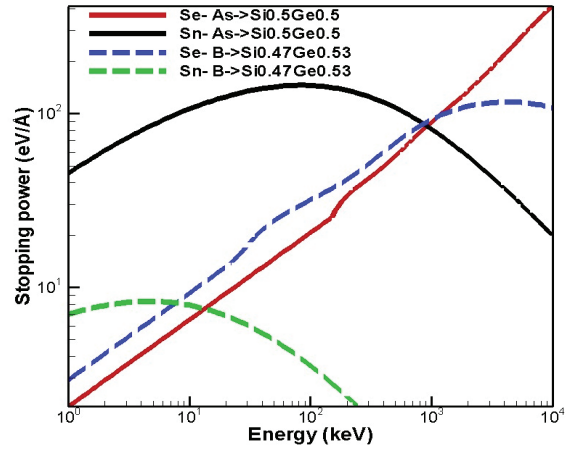


Fig. 1. Comparison with stopping powers extracted in boron implanted Si_{0.47}Ge_{0.53} and in arsenic implanted Si_{0.5}Ge_{0.5} using SRIM simulation.

S_e는 10 MeV에서 415.3 eV/Å로 계속 증가하였으며, S_n는 80 keV에서 최대치인 145 eV/Å로 각각 나타났다.

본 논문에서는 해석적인 방법을 적용하여 측정된 SIMS data와 잘 일치하는 도핑분포를 나타낼 수가 있었다. Dual pearson [18,19]을 적용한 analytical method를 적용해 range scaling factor를 조정하여 도핑분포를 나타내었다. Dual pearson은 8개의 range parameters와 dose 비로 구성된 총 9개의 parameters를 사용하였다. SRIM 시뮬레이션을 통하여 20 keV로 ¹¹B를 실리콘에 이온주입 하면 R_p는 77.1 nm가 되고 같은 에너지로 ¹¹B를 Ge에 이온주입 하면 R_p는 50.2 nm가 된다. Ge의 mole fraction x=0.53인 경우 SRIM 시뮬레이션의 R_p는 57.9 nm로 나타나서 SIMS data보다 작은 값으로 나타났다. 따라서 unstrained Si_{0.47}Ge_{0.53}에서 range에 대한 scaling factor를 적용하여 R_p를 구하는 개선된 식은 식 (13)에 나타내었다.

$$R_p = [R_p(Si) - R_p(Ge)] \times (1 - x) + R_p(Ge) \quad (13)$$

여기서 x는 Ge의 mole fraction을 나타낸다. 위의 수식에 따라서 계산한 결과 값은 R_p = 61.8 nm를 나타내어서 SRIM 시뮬레이션 data보다는 SIMS data에 더 근접하는 결과를 나타내었다. ΔR_p의 계산법은 dual pearson의 방법으로부터 추출한 ΔR_{p1}과 ΔR_{p2}를 적용하여 식 (14)와 같이 구할 수가 있다.

$$\Delta R_p = \left(\frac{R_p}{X_p} \right) \left(\frac{\Delta R_1 + \Delta R_2}{K} \right) \quad (14)$$

여기서 X_p 는 peak 농도에서의 깊이를 나타낸다.

이 수식은 이온주입 dose가 $1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 이하일 때 B의 경우는 K 의 값이 점차적으로 작아지고 K 가 2에서 1.5로 변하게 적용된다. 그러나 B의 높은 dose와 As의 경우는 식 (14)에서처럼 $X_p = R_p$ 가 되고 $K=2$ 가 되어 거의 gauss 분포에 가까운 대칭구조로 나타나게 된다. 이러한 해석적인 수식은 dual pearson 분포에서 단 두 번째 pearson 분포가 X_p 보다 더 큰 경우에만 적용이 된다. 20 keV로 ^{11}B 를 relaxed $\text{Si}_{0.47}\text{Ge}_{0.53}$ epi층으로 이온주입 하게 되면, 이 경우는 K 의 값이 1.8을 나타내었다. 이러한 해석적인 방법으로부터 계산한 ΔR_p 값은 41 nm이고 SIMS data는 41.7 nm를 각각 나타내었다. 본 연구에서 3번째 및 4번째 모멘트인 γ (skewness)와 β (kurtosis)는 dual pearson 분포에서 γ, β 는 각각의 pearson 분포에서 평균값을 적용하였고 그 결과를 표 1에 나타내었다. 현재의 B 이온 주입 및 확산모델은 실험 데이터와 잘 일치 않은 결과를 나타내고 있다. 다양한 입사각도에 따른 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 기판 표면에서 As의 sputtering yield는 T-dyn simulation tool [15-16]을 사용하였고 다양한 각도로 입사시킨 이온들의 분포로부터 data를 추출하여 ICECREM tool [17]에 range parameter를 대입시킨다. 다양한 이온주입 각도로 입사된 이온들의 분포를 3차원 분포로 나타내어서 서로 비교해 본다. Sputtering 효과에 의한 표면 부식층 두께(X_s)는 식 (15)와 같이 나타낼 수 있다.

$$X_s = \frac{S}{N} \phi \quad (15)$$

여기서 S 는 sputtering yield이고 N 는 target의 density이고 ϕ 는 dose를 각각 나타낸다. X_s 가 일정한 경우 주입된 이온의 농도 분포는 gauss 분포로 식 (16)과 같이 나타낼 수가 있다.

$$C(x) = \frac{N}{2S} \left(\text{erf} \frac{x - R_p + X_s}{\sqrt{2} \Delta R_p} - \text{erf} \frac{x - R_p}{\sqrt{2} \Delta R_p} \right) \quad (16)$$

일반적으로 n 타입 도핑을 위해서 $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ 에서 As 이온의 주입각도와 에너지에 대한 T-dyn의 sputtering yield 시뮬레이션 결과를 그림 5 (p. 382)에 나타내었다. 주입된 As 이온들의 열처리 후에 나타나는 이온 분포는 식 (17)과 같이 나타낼 수가 있다.

Table 1. Range moments of SIMS data, SRIM and dual pearson simulations in boron implanted $\text{Si}_{0.47}\text{Ge}_{0.53}$ layer.

Type	R_p	ΔR_p	γ	β
SIMS	0.0672	0.0417	0.876	1.89
SRIM	0.0579	0.0397	0.129	2.48
Analytical method	0.0618	0.041	0.062	3.485
Dual pearson	0.0631	0.038	0.071	3.48
	0.099	0.055	0.053	3.49
B->silicon marlowe	0.0818	0.04	0.688	4.34

Beam energy: 20 keV, Ion beam: $^{11}\text{B}^+$, Incident angle 7° ,
Samples: $\text{Si}_{0.47}\text{Ge}_{0.53}$, unit (μm)

$$C(x,t) = \frac{N_{\text{dose}}}{\sqrt{2\pi(\Delta R_p^2 + 2Dt)}} e^{\left[\frac{-(x-R_p)^2}{2(\Delta R_p^2 + 2Dt)} \right]} \quad (17)$$

다양한 열처리 온도에 따른 확산계수의 값 변화와 사용된 SiGe 기판에서 Ge의 조성비에 따른 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 의 물질구조에 따라서 atomic density, 확산계수, range parameter를 계산한다. 이러한 data로부터 열처리된 농도 분포를 나타내고자 한다.

3. 결과 및 고찰

그림 2는 Si 기판 위 relaxed $\text{Si}_{0.47}\text{Ge}_{0.53}$ epi층에 $^{11}\text{B}^+$ 를 dose가 $6 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ 이고 20 keV 에너지로 이온주입 하였다. SIMS로 측정하여 나타난 B의 도핑 분포를 SRIM tool을 적용해 서로 비교하였다. SRIM 시뮬레이션의 결과는 peak 농도 분포 영역에서는 잘 일치하였지만 channeling tail을 나타내는 SIMS data와는 큰 차이를 나타내었다.

따라서 본 연구에서는 dual pearson 방법을 적용하여 SIMS data와 매우 잘 일치하는 분포를 나타내었다. dose 비율은 0.84를 나타내었고 농도 분포의 모멘트는 표 1과 같다.

또한 해석적인 방법을 적용하여 농도 분포를 그림 2에 나타내었다.

이 경우 최대 농도 값 영역에서는 아주 잘 일치하는 것을 확인할 수가 있다. 그러나 tail 근방에서는 약간의 편차를 나타내었다. Channeling을 묘사하는 UT-marlowe 시뮬레이션 [18,19]을 적용해서 서로 비교하였다. 실리콘과 $\text{Si}_{0.47}\text{Ge}_{0.53}$ 에서 B의 분포가 Ge 성분의 추가 때문에 R_p 값이 더 작게 나타나서 침투 깊이가

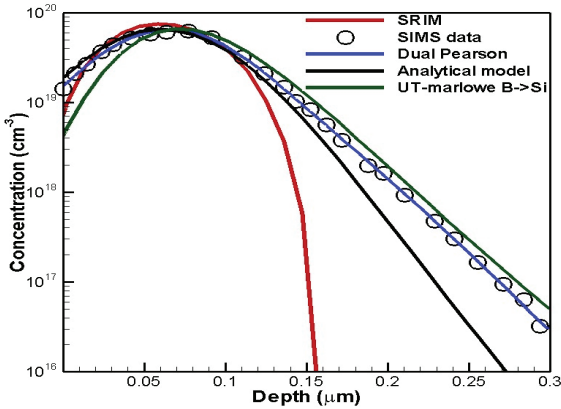


Fig. 2. Comparison with simulated and measured SIMS data in boron implanted $\text{Si}_{0.47}\text{Ge}_{0.53}$ using 20 keV at 7° tilt.

Table 2. Range moments of SIMS data, SRIM and dual pearson simulations in arsenic implanted $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ layer.

Type	R_p	ΔR_p	γ	β
SIMS	0.0451	0.032	1.78	7.17
SRIM	0.0407	0.0165	0.39	3.0
Analytical method	0.043	0.0294	0.4	3.51
Dual pearson	0.0406	0.0194	0.79	4.01
	0.0879	0.0507	0	3

Beam energy: 60 keV, Ion beam: $^{33}\text{As}^+$, Incident angle 7° , Samples: $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$, unit (μm)

Table 3. Range moments of SIMS data, SRIM and dual pearson simulations in arsenic implanted $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ layer.

Type	R_p	ΔR_p	γ	β
SIMS	0.0352	0.0245	2.21	10.7
SRIM	0.0356	0.0162	0.43	3.02
Analytical method	0.0382	0.034	0.28	3.36
Dual pearson	0.0352	0.0172	0.56	3.08
	0.0489	0.0498	0	3.64

Beam energy: 60 keV, Ion beam: $^{33}\text{As}^+$, Incident angle 7° , Samples: $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$, unit (μm)

더 작아짐을 확인할 수가 있다. 표 1~3에 나타난 해석적인 모델의 range data는 기존의 식 (6)~(9)의 식들을 사용해서 계산한 값이 아니고 독자적인 식 (13)과 (14)를 적용해서 구한 값들을 제시하고 있다. $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 층에서 이온주입된 불순물의 분포에 대한 범용 tool은 현재 없는 편이다.

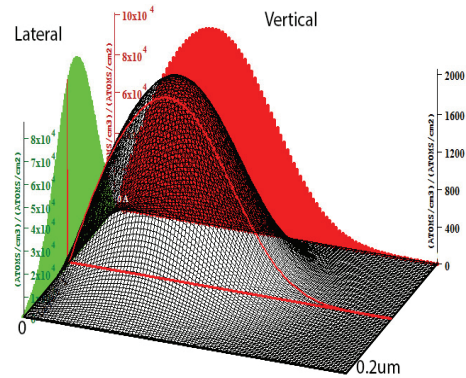


Fig. 3. Three-dimensional boron profile in implanted $\text{Si}_{0.47}\text{Ge}_{0.53}$ with 20 keV at 7° tilt using SRIM simulation.

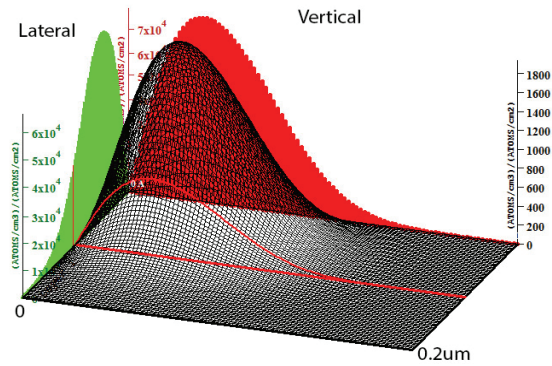


Fig. 4. Three-dimensional boron profile in implanted $\text{Si}_{0.47}\text{Ge}_{0.53}$ with 20 keV at 60° tilt using SRIM simulation.

B와는 다르게 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 층으로 As의 이온주입의 경우는 더 많은 핵 충돌과 Ge의 mole fraction이 증가함에 따라서 density의 증가로 나타난다. 따라서 표면층의 조직이 더 치밀해지기 때문에 As 이온의 침투 깊이는 점차적으로 감소하게 된다. 따라서 Ge 성분이 더 증가함에 따라서 As 이온의 침투 깊이는 표 2와 3에 나타낸 것처럼 점차적으로 감소하게 된다. As 이온주입의 가속에너지는 60 keV이고 주입량은 $1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 인 경우에 range data를 표 2와 3에 각각 나타내었다. Dual pearson 모델의 경우에 표 2의 $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ 에서는 dose ratio가 0.88이고 표 3에서는 0.82로 각각 나타났다.

그림 3과 4는 SRIM 결과로부터 $^{11}\text{B}^+$ 이온이 relaxed $\text{Si}_{0.47}\text{Ge}_{0.53}$ 층에 입사각이 7° 와 60° 로 B가 주입된 3차원의 농도 분포를 나타내고 있다. 여기서 수직과 측면방향의 치수는 각각 $0.2 \mu\text{m}$ 와 $0.1 \mu\text{m}$ 이다. SRIM의 결과로부터 입사각이 7° 인 경우는 backscatter된 B 이온이

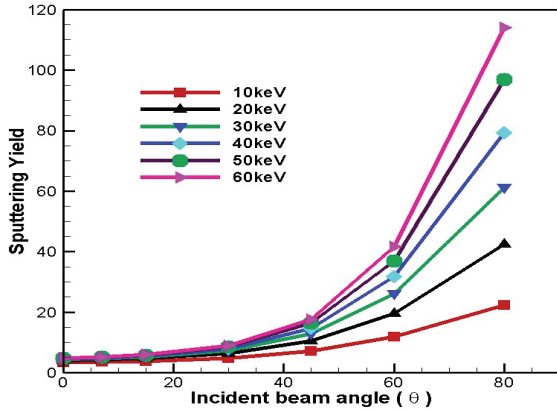


Fig. 5. Sputtering yield from different incident angles and energies using arsenic implantation with a dose of $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ in $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$.

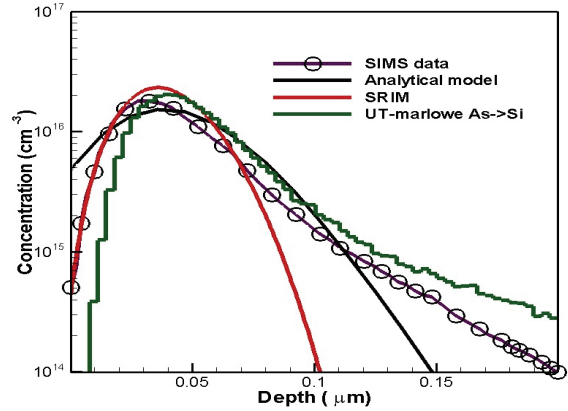


Fig. 6. Comparison with simulated and measured SIMS data in arsenic implanted $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ using 60 keV at 7° tilt.

총 10만 개의 입사 이온 가운데서 200개로 나타나서 0.2%의 반사를 나타내었다. 그러나 60°로 기울어진 경우 약 26%의 더 많은 반사를 나타내고 수직방향보다는 상당히 기울어진 각도의 입사 때문에 수직방향 ΔR_p 의 값이 7°일 때에 397 Å에서 60°에서는 251 Å로 더 크게 나타나고 축 방향으로 더 가깝게 접근하고 축면방향으로는 ΔR_L 이 357 Å에서 611 Å으로 더 큰 값으로 나타난 결과를 나타내어서 축면방향으로 더 크게 기울어져 있음을 그림 3과 4를 서로 비교해서 확인할 수 있다.

As가 이온 주입된 $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ 층의 표면에서 입사각과 가속에너지에 따른 sputtering rate는 그림 5에 나타내었다. 또한 에너지 증가와 입사각이 60° 이상부터는 sputtering rate가 실리콘에서 보다 더 가파르게 증가함을 확인하였다. 일반적으로 n 타입 도핑을 위해서 $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ 에서 As 이온의 주입각도와 에너지에 따른 sputtering yield를 T-dyn의 시뮬레이션을 통하여 그 결과를 그림 5에 나타내었다. 입사된 이온당 sputtering 된 기판원자의 수를 즉 sputtering yield (Y)라고 한다. 여기서 사용된 수식은 식 (18)에 나타내었다.

$$Y = (0.042 \times \alpha \times S_n(E) / U) \times \sqrt{1 - \left(\frac{E_{th}}{E}\right)^2} \quad (18)$$

여기서 $\alpha \times S_n(E)$ 는 sputtering에 대한 표면에서의 축척된 에너지를 나타내며, E는 이온의 에너지, E_{th} 는 sputtering이 나타나는 임계에너지를 U는 sublimation 에너지를 각각 나타낸다. disorder profile은 전체 변위를 나타내며 수식은 식 (19)에 나타내었다.

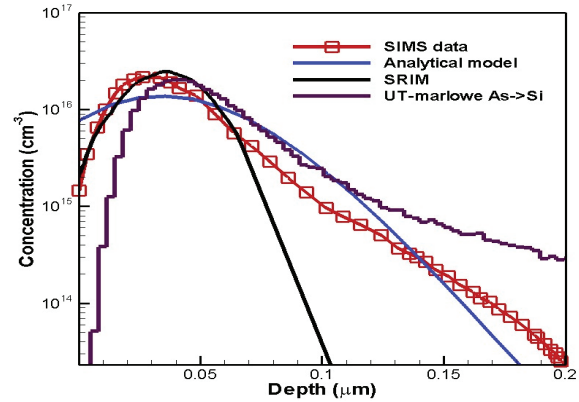


Fig. 7. Comparison with simulated and measured SIMS data in arsenic implanted $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ using 60 keV at 7° tilt.

$$D(x) = N \times (1 - \exp(-P(x)/Y)) \quad (19)$$

여기서 N는 기판의 원자밀도를, Y는 sputtering yield를, P(x)는 damage(x)의 적분을 나타내며, 이온빔에 의해서 x와 x+vt 사이에서 vt는 즉 eroded thickness를 나타낸다. 입사각과 에너지에 따른 sputtering yield를 그림 5에 나타내었다. 실리콘과는 다르게 $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ 층에서는 용해점이 1,109°C이고 밀도가 실리콘인 2.33에서 3.951 g/cm³로 더 크게 변하기 때문에 As의 이온주입 경우에 50 keV에서 입사각도가 80°인 경우 100% 실리콘과 비교해서 약 3.5배 더 큰 sputtering yield를 나타내었다.

표 2와 3으로부터 이온주입 된 As의 분포를 그림 6과 7에 각각 나타내었다. UT-marlowe의 시뮬레이션을 위해서 random 수는 10만 개로 계산하였다. 그림

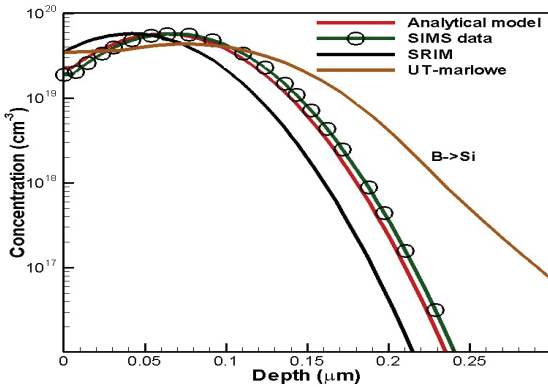


Fig. 8. Comparison with annealed SIMS and simulated data in boron implanted $\text{Si}_{0.47}\text{Ge}_{0.53}$ at 950°C for 1 minute.

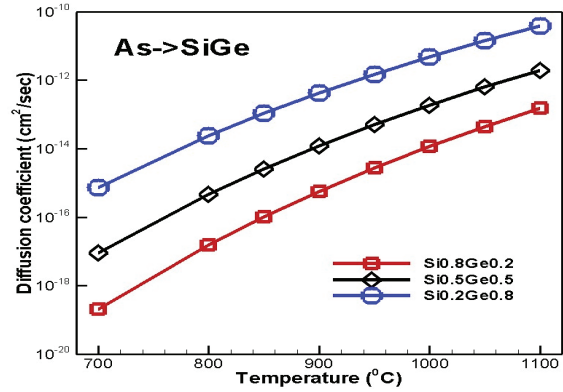


Fig. 11. Comparison of diffusion coefficients in accordance with Ge contents in arsenic implanted $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ from different temperature.

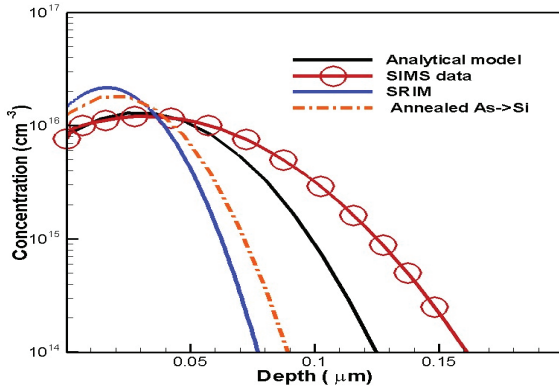


Fig. 9. Comparison with annealed SIMS and simulated data in arsenic implanted $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ at $1,000^\circ\text{C}$ for 1 minute.

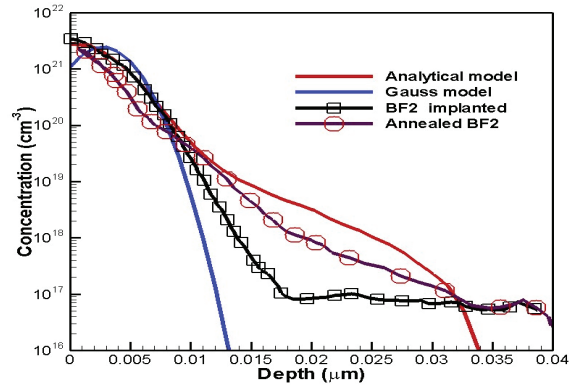


Fig. 12. Comparison with annealed SIMS and simulated data in BF_2 implanted $\text{Si}_{0.72}\text{Ge}_{0.28}$ at $1,000^\circ\text{C}$ for 1 minute.

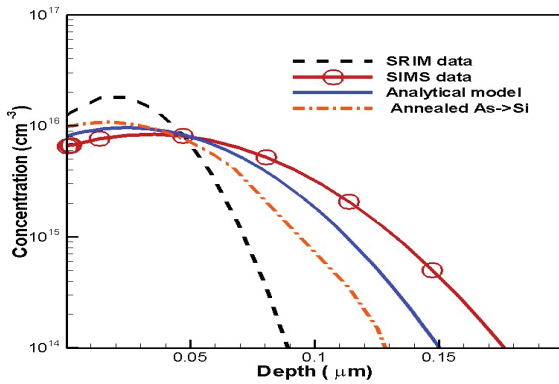


Fig. 10. Comparison with annealed SIMS and simulated data in arsenic implanted $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ at $1,000^\circ\text{C}$ for 1 minute.

6과 7에서 channeling 분포를 각각 나타내고 있다.

이온주입 된 B와 As의 열처리 후에 나타나는 확산계수 및 확산에 의한 불순물 재분포를 그림 8~12에 나타

내었다. 그림 8은 B의 주입 후에 950°C 에서 1분간 열처리 후에 나타난 농도 분포를 UT-marlowe 시뮬레이션 결과와 서로 비교하였다. B 이온의 확산은 실리콘에서보다 $\text{Si}_{0.47}\text{Ge}_{0.53}$ 에서 확산 효과가 현저히 적게 나타남을 확인할 수 있었다. 이 이유는 B 이온이 B-Ge pairing 결합에 기인한 확산 저지 효과를 나타내기 때문이다. 제안한 해석적인 모델이 SRIM 데이터보다는 SIMS 데이터와 잘 일치함을 알 수 있다. 실리콘에서 B 이온의 확산계수는 $6.45 \times 10^{-15} \text{ cm}^2/\text{s}$ 인 반면에 $\text{Si}_{0.47}\text{Ge}_{0.53}$ 에서는 $2.14 \times 10^{-16} \text{ cm}^2/\text{s}$ 로 나타나서 확산 효과가 현저히 적게 나타났다 [18-23].

그림 9와 10에서 나타난 것처럼 As가 이온주입 후에 $1,000^\circ\text{C}$ 에서 1분간 N_2 gas 분위기에서 열처리하였을 때 As의 확산 효과가 Si에서보다 relaxed $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ 에서 더 크게 나타남을 그림 9에서 확인할 수가 있었다. $1,000^\circ\text{C}$ 에서 As의 확산계수는 실리콘에서 $2.55 \times 10^{-15} \text{ cm}^2/\text{s}$ 이

고 $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ 에서는 $1.18 \times 10^{-14} \text{ cm}^2/\text{s}$ 로 나타나서 실리콘에서 보다 4.62배로 더 크게 나타났다. $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 에 주입된 As의 확산은 실리콘에 비해서 tail 부근에서 1.78배로 더 크게 나타났다. 또한 제시한 해석적인 모델은 확산 후에 SIMS 데이터와 약 3.7% 이내의 오차를 나타내어서 비교적 잘 일치함을 확인할 수가 있다.

그림 10은 $1,000^\circ\text{C}$ 에서 As의 확산계수가 실리콘에서 $2.55 \times 10^{-15} \text{ cm}^2/\text{s}$ 이고 $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ 에서 $1.88 \times 10^{-13} \text{ cm}^2/\text{s}$ 로 훨씬 더 크게 나타났다. $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 에 주입된 As의 확산은 실리콘에 비해서 tail 부근에서 1.35배로 더 크게 나타났다. 제시한 해석적인 모델은 확산 후에 SIMS 데이터와 비교해서 3.38%의 오차를 나타내어서 비교적 잘 일치함을 확인할 수가 있다.

또한 Ge의 조성비에 따른 800°C 에서 $1,100^\circ\text{C}$ 의 온도 범위에서 확산계수는 curve fitting을 통하여 식 (20)~(22)와 그림 11에 나타내었다 [12]. 여기서 단위는 cm^2/s 이다.

$$D(\text{As}) = D_0 \exp\left[-\frac{E_a}{kT}\right] \quad (20)$$

$$E_a(eV) = 0.726x^3 - 2.489x^2 + 0.3799x + 3.82 \quad (21)$$

$$D_0(\text{cm}^2/\text{s}) = 171.2x^3 - 317.95x^2 + 147.68x + 6.02 \quad (22)$$

그림 12는 BF_2 가 $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ 에 이온주입 하고 열처리 하여 나타난 B의 농도 분포를 SIMS data와 gauss 모델과 서로 비교하였다. Gauss 모델인 경우, R_p 값은 2.7 nm, ΔR_p 값은 2.1 nm를 나타냈고 해석적인 모델의 시뮬레이션 결과, R_p 값은 2.94 nm, ΔR_p 값은 2.54 nm로 각각 나타났다. $\text{BF}_2(49)$ 는 B(11)와 비교해서 4.46배의 질량이 더 무거운 분자이온이고 높은 dose로 주입한 경우 거의 gauss 분포로 나타나게 된다. BF_2 가 높은 dose로 주입된 경우는 식 (23)과 같이 gauss 분포로 나타나게 된다.

$$C(x) = \frac{C_{\text{dose}}}{\sqrt{2\pi} \Delta R_p} \exp\left[-\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right] \quad (23)$$

$1,070^\circ\text{C}$ 에서 10초간 RTA (rapid thermal annealing) 한 경우에 SIMS data는 시뮬레이션 결과들과 서로 비교하였다. 이 경우 SiGe에 열처리한 B의 확산계수는 $1.11 \times 10^{-13} \text{ cm}^2/\text{s}$ 이고 실리콘에서는 $3.04 \times 10^{-13} \text{ cm}^2/\text{s}$

를 나타내어 실리콘에서보다 확산 계수가 약 2.74배로 감소함을 식 (24)로부터 확인하였다 [23].

$$D(\text{SiGe}) = D(\text{Si}) \times \exp\left[-4.2 \times 10^{-6} \times \left(e^{\frac{1.58}{kT}} \times x\right)\right] \quad (24)$$

4. 결론

$\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 층에서 Ge의 조성비가 더 커짐에 따라서 더 큰 전자 및 핵 정지력 때문에 shallow doping 분포를 나타낸다. $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 층에서 As와 B의 농도 분포와 range, 열처리 후에 확산 효과를 나타내는 불순물의 재분포를 본 연구에서는 dual pearson 방법처럼 9개의 변수가 아닌 단지 4개의 moments만을 사용한 해석적인 방법을 적용하여 농도 분포를 확인할 수 있는 컴퓨터 모델링 방법을 처음으로 제시하였다. B 이온주입의 경우에 SIMS data와 비교하여 R_p 는 8%를 ΔR_p 는 1.8%의 오차를 나타내었다. As의 경우는 $\text{Si}_{0.2}\text{Ge}_{0.8}$ 층에서 R_p 는 4.7%를 ΔR_p 는 8.1%의 오차를 나타내었다. $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ 층에서 As는 R_p 가 8.5%를, ΔR_p 는 38%의 오차를 나타내어서 Ge의 조성비가 커짐에 따라서 R_p 와 ΔR_p 값의 오차가 더 증가함을 확인할 수 있었다. R_p 와 ΔR_p 를 구하기 위해서 일반적인 식 (6)과 (7)이 아닌 독자적인 식 (13)과 (14)를 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 층에 적용함으로써 제안한 모델은 이온주입은 물론 열처리 후에 나타난 확산된 SIMS 실험 데이터와 비교해 본 결과 B인 경우에 R_p 가 7.3%를 ΔR_p 는 3.5%의 오차를 나타내었고 As인 경우에는 $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ 층에서 R_p 가 3.7%를 ΔR_p 는 0.6%의 오차를 나타냈으며, $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ 층에서는 R_p 가 3.38%와 ΔR_p 는 1.05%의 오차를 나타내었다. 따라서 본 해석적인 모델은 SIMS data와 잘 일치함을 확인할 수 있었다. 그러나 BF_2 의 경우는 R_p 가 13%를 ΔR_p 가 27%의 오차를 나타내어서 SIMS data와 다소 큰 오차를 나타내었다. 이 이유는 $\text{Si}_{0.72}\text{Ge}_{0.28}$ 층에서 확산 동안에 B 이온과는 반대방향인 표면의 바깥쪽으로 F 이온이 이동하는 복잡한 현상 때문이라고 판단된다. 열처리 후에 F 이온의 거동에 대한 다양한 실험이 더 필요한 실정이다. 그럼에도 불구하고 이러한 해석적인 방법은 SiGe과 SiGe:C 등의 화합물 반도체에 대한 이온주입 및 확산실험에도 적용될 수 있다고 사료된다. $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 에서 As 이온의 확산 효과는 실리콘에서보다 tail 부근에서 1.78배로 확산 효과가 더 증가하였다. 반면에 B는 Ge의 성분이

증가함에 따라서 B-Ge pairing 효과로 말미암아 오히려 확산 방해 효과가 나타났다. $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 층에서 Ge의 성분은 좁아진 band gap 현상을 초래하고 B 이온주입은 특히 p-MOS의 속도 향상을 나타나기 때문에 고속반도체 소자인 CMOS 집적회로 공정기술을 위해서 본 실험 데이터가 적용될 것으로 사료된다.

감사의 글

이 논문은 2017학년도 경기대학교 연구년 수혜로 연구되었음.

REFERENCES

- [1] S. Jayanarayanan, F. Prins, X. Chen, and S. Banerjee, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.*, **686**, A2.8 (2002). [DOI: <https://doi.org/10.1557/PROC-686-A2.8>]
- [2] W. P. Maszara, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.*, **686**, A2.5 (2002). [DOI: <https://doi.org/10.1557/PROC-686-A2.5>]
- [3] A. G. O'Neill and D. A. Antoniadis, *IEEE Trans. Electron Devices*, **43**, 911 (1996). [DOI: <https://doi.org/10.1109/16.502123>]
- [4] Z. Shi, X. Chen, D. Onsongo, E. J. Quinones, and S. K. Banerjee, *Solid-State Electron.*, **44**, 1223 (2000). [DOI: [https://doi.org/10.1016/S0038-1101\(00\)00031-9](https://doi.org/10.1016/S0038-1101(00)00031-9)]
- [5] J. B. Roldán, F. Gámiz, J. A. López-Villanueva, and J. E. Carceller, *Semicond. Sci. Technol.*, **12**, 1603 (1997). [DOI: <https://doi.org/10.1088/0268-1242/12/12/010>]
- [6] J. P. Dismukes, L. Ekstrom, E. F. Steigmeier, I. Kudman, and D. S. Beers, *J. Appl. Phys.*, **35**, 2899 (1964). [DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1713126>]
- [7] H. Morkoc, B. Sverdlov, and G. B. Gao, *Proc. IEEE*, **81**, 493 (1993). [DOI: <https://doi.org/10.1109/5.219338>]
- [8] J. D. Cressler, E. F. Crabbe, J. H. Comfort, J.Y.C. Sun, and J.M.C. Stork, *IEEE Electron Device Lett.*, **15**, 472 (1994). [DOI: <https://doi.org/10.1109/55.334671>]
- [9] L. D. Lanzerotti, A. S. Amour, C. W. Liu, J. C. Sturm, J. K. Watanabe, and D. Theodore, *IEEE Electron Device Lett.*, **17**, 334 (1996). [DOI: <https://doi.org/10.1109/55.506359>]
- [10] K. Washio, E. Ohue, K. Oda, M. Tanabe, H. Shimamoto, and T. Onai, *Proc. International Electron Devices Meeting. IEDM Technical Digest* (IEEE, Washington, USA, 1997). p. 795.
- [11] D. L. Harnme and B. S. Meyerson, *IEEE Trans. Electron Devices*, **48**, 2555 (2001). [DOI: <https://doi.org/10.1109/16.960383>]
- [12] J. D. Cressler, *SiGe and Si Strained-Layer Epitaxy for Silicon Heterostructure Devices* (FL. CRC Press, New York, 2008) p. 89.
- [13] J. F. Ziegler, J. P. Biersack, and U. Littmark, *The Stopping and Range of Ions in Solids* (Pergamon, New York, 1985) p. 52.
- [14] W. Möller, W. Eckstein, and J. P. Biersack, *Comput. Phys. Commun.*, **51**, 355 (1998). [DOI: [https://doi.org/10.1016/0010-4655\(88\)90148-8](https://doi.org/10.1016/0010-4655(88)90148-8)]
- [15] W. Möller and W. Eckstein, *Nucl. Instrum. Methods B*, **2**, 814 (1984). [DOI: [https://doi.org/10.1016/0168-583X\(84\)90321-5](https://doi.org/10.1016/0168-583X(84)90321-5)]
- [16] J. P. Biersack, S. Berg, and C. Nender, *Nucl. Instrum. Methods B*, **59**, 21 (1991). [DOI: [https://doi.org/10.1016/0168-583x\(91\)95167-c](https://doi.org/10.1016/0168-583x(91)95167-c)]
- [17] H. Ryssel, J. Lorenz, and K. Hoffmann, *Appl. Phys.*, **A41**, 201 (1986). [DOI: <https://doi.org/10.1007/bf00616841>]
- [18] S. H. Yang, S. J. Morris, D. L. Lim, A. F. Tasch, R. B. Simonton, D. Kamenitsa, C. Magee, and G. Lux, *J. Electron. Mater.*, **23**, 801 (1994). [DOI: <https://doi.org/10.1007/bf02651376>]
- [19] K. M. Klein, C. Park, and A. F. Tasch, *Nucl. Instrum. Methods B*, **59**, 60 (1991). [https://doi.org/10.1016/0168-583x(91)95175-d]
- [20] L. A. Edelman, M. S. Phen, K. S. Jones, R. G. Elliman, and L. M. Rubin, *Appl. Phys. Lett.*, **92**, 172108 (2008). [DOI: <https://doi.org/10.1063/1.2919085>]
- [21] P. Kuo, J. L. Hoyt, J. F. Gibbons, J. E. Turner, and D. Lefforge, *Appl. Phys. Lett.*, **66**, 580 (1995). [DOI: <https://doi.org/10.1063/1.114019>]
- [22] R. Wittmann, S. Uppal, A. Hössinger, J. Cervenka, and S. Selberherr, *ECS Trans.*, **3**, 667 (2006). [DOI: <https://doi.org/10.1149/1.2355862>]
- [23] C. C. Wang, Y. M. Sheu, S. Liu, R. Duffy, A. Heringa, N.E.B. Cowern, and P. B. Griffin, *Mater. Sci. Eng., B*, **124**, 39 (2005). [DOI: <https://doi.org/10.1016/j.mseb.2005.08.127>]