

분광 타원해석법에 의한 SIMOX 층구조 분석

이창희 · 이순일

아주대학교 물리학과
(1995년 9월 25일 접수)

Spectro-ellipsometric Analysis of SIMOX Structures

Chang Hee Lee and Soonil Lee

Department of Physics, Ajou University, Suwon 442-749, Korea
(Received September 25, 1995)

요 약 - 200 keV의 에너지로 산소 이온들을 주입한 후 열처리하여 만든 SIMOX의 층구조를 분광 타원해석법을 이용하여 비파괴적으로 분석하여, 약 300 Å의 계면층과 800 Å의 매몰산화층이 3360 Å 정도의 결정성 실리콘층 아래에 존재하는 것을 알 수 있었다. 이러한 매몰산화층의 분포와 TRIM 전산시뮬 결과의 비교로부터 매몰산화층의 형성은 산소 이온들이 열처리에 따라 이온 주입시 실리콘의 비정질화가 최대인 곳 주변으로 이동하여 이루어짐을 알 수 있었다. 또한 측정 위치에 따른 분광 타원해석 상수들의 변화로부터 이온주입시의 이온빔의 형태와 주사 방향의 영향으로 생긴 SIMOX 층구조의 비균일성을 알 수 있었다.

Abstract - SIMOX structures which are formed by oxygen-ion implantation at an energy of 200 keV and subsequent annealing are analyzed using the nondestructive spectroscopic ellipsometry. The SIMOX wafer is found to have about 800 Å thick buried oxide layer and 300 Å thick interface layer below about 3360 Å thick c-Si layer. Based on the comparison of the depth profile of the SIMOX wafer with the result of TRIM'92 simulation, we conclude that the buried oxide layer is formed as the implanted oxygen ions are concentrated in the vicinity of the maximum damage density region during annealing. Finally, we conclude that the observed inhomogeneity of the SIMOX structures depends on the beam profile and the beam scan direction during implantation.

1. 서 론

최근 집적회로의 제작에 덩어리 실리콘 재료 대신에 SOI(Silicon on Insulator) 구조를 사용하려는 시도가 많은 관심을 끌고 있다[1, 2]. SOI 구조를 만드는 유력한 방법중의 하나는 실리콘에 산소이온을 주입한 후 열처리하여 결정성 실리콘 아래에 실리콘 산화층을 만드는 것으로 SIMOX(Separation by Ion Implantation of Oxygen)법이라 한다[3]. 이와 같이 만들어진 시료는 두께와 조성비가 다른 여러 층들로 이루어져 있으므로 층구조 분석을 통하여 각 층의 두께, 각 층내 성분의 조성비 등의 구조상수들을 결정하는 것이 SIMOX 시료를 이해하고 제작하는데 매우 중요하다.

전통적으로 층구조 분석에 많이 이용되어온 TEM,

RBS, SIMS들의 방법이 파괴적이라는 단점이 있는데 비하여 이 논문에서 사용된 분광 타원해석법(Spectroscopic Ellipsometry, SE)은 비파괴적으로 시료의 층구조를 알 수 있다는 것이 큰 장점이다[4, 5]. 타원해석법은 편광상태의 빛이 시료에 입사한 후 반사되거나 투과하면서 미시구조와 표면조건에 민감하게 반응하여 나타나는 편광상태의 변화로부터 미지의 시료에 대한 구조적인 정보와 광학적 함수들을 알아낼 수 있는 광학적인 분석 방법이다[4, 5]. 측정에 사용된 빛의 에너지에 따라 투과 깊이가 달라지므로 층구조 분석이 가능한데, 이 논문에서는 2.0~4.0 eV 범위에서 측정을 하였다.

주입된 이온은 시료내의 전자 및 핵들과 충돌하여 산란을 일으키며 에너지를 잃게 되는데, 핵에 의한 에너지 손실(nuclear energy loss)과 전자에 의한 에너지손실

(electronic energy loss) 둘다가 입사 이온에너지의 함수이다. 이에 따라 주입이온이 정지할 때까지 움직인 투사거리(range)는 초기 입사 이온에너지에 따라 결정된다[6, 7]. 또한 주입된 이온과 핵간의 충돌은 실리콘원자들의 변위를 일으키며 결함이 축적되면 결정영역이 무질서해지거나 비정질화하게 되는데, 이와 같은 손상층의 분포와 정지한 주입이온의 분포는 일반적으로 일치하지 않는다[8].

이온주입에 의해 실리콘에 As, P, BF₂ 등의 첨가물(dopant)을 주입하는 경우, 손상층의 형성은 반도체의 전기적 특성을 변화시키는 부작용이 따르게 된다. 따라서 이온주입 후에는 결정구조를 회복시키기 위해 반드시 열처리를 해주어야 하는데, 이때 첨가물의 재분포와 활성화도 동시에 일어난다[6]. 산소를 주입하고 열처리하여 만든 SIMOX 시료의 경우에는 열처리 과정에서 실리콘의 재결정화와 더불어 매몰산화층이 형성되므로 손상층의 분포와 더불어 정지한 주입이온의 분포를 동시에 고려하여야만 SIMOX 형성기구를 이해할 수 있다.

2. 이 론

타원해석법 및 타원해석기 등에 관해서는 이미 비교적 널리 알려져 있기 때문에 여기서는 간략하게 소개하기로 한다. 타원해석상수인 Δ 와 ψ 는 아래의 식 (1)과 같이 정의된다[5, 9-11]. 여기서 $\tan\psi$ 는 반사에 따른 p파와 s파의 진폭의 비, Δ 는 반사에 따른 p파와 s파의 위상변화의 차이이며, Δ 와 ψ 는 실수각으로서 각각 0~360°, 0~90°의 범위를 갖는다. Δ 와 ψ 의 표현은 2상계는 물론 다중박막이 있는 시료에서도 p파와 s파의 반사율의 비로 동일하게 정의된다.

$$\rho = \tan \psi e^{i\Delta} = \frac{r_p}{r_s} \quad (1)$$

회전검광자형의 타원해석기가 이상적인 부품들로 이루어져 있을 경우 측정되는 광의 세기는 회전편광자의 각도(P)의 함수으로써 다음 (2)식과 같이 표현되며 이식의 푸리에 계수인 (α_0, β_0)와 검광자의 각도(A)로써 타원해석상수를 $\tan\psi, \cos\Delta$ 의 형태로 식 (3), (4)와 같이 나타낼 수 있다[12].

$$I(P) = I_0(1 + \alpha_0 \cos 2P + \beta_0 \sin 2P) \quad (2)$$

$$\tan \psi = \tan A \sqrt{\frac{1 + \alpha_0}{1 - \alpha_0}} \quad (3)$$

$$\cos \Delta = \frac{\beta_0}{\sqrt{1 - \alpha_0^2}} \quad (4)$$

SIMOX 시료의 비정질층, 산화층, 그리고 이들과 결정질층과의 혼합층들은 미시적으로는 이질적(heterogeneous)이지만 거시적으로는 동질적(homogeneous)인 물리적 혼합체 (physical mixture)로 근사하여 취급하고 이 혼합체의 총체적인 광학적 반응은 유효매질이론(effective medium theory)으로 구하였다. 각 구성성분의 크기가 거시적인 맥스웰 방정식이 적용될 수 있으나 물질내에서의 빛의 파장보다는 훨씬 작은 크기일 때 그 혼합체의 유효유전율 $\langle \epsilon \rangle$ 은 각 구성성분의 복소굴절율, 조성비 및 조성형태에 따라 다음과 같이 주어진다[13].

$$\frac{\langle \epsilon \rangle - \epsilon_h}{\epsilon_h + L(\langle \epsilon \rangle - \epsilon_h)} = \sum_j \frac{f_j}{3} \sum_{i=3} \frac{\epsilon_j - \epsilon_h}{\epsilon_j + L_i(\epsilon_j - \epsilon_h)},$$

$$j = a, b, c \quad (5)$$

단 f_j 는 j 번째 성분의 조성비이며 $\epsilon_i (= \epsilon_a, \epsilon_b, \epsilon_c)$ 는 a, b 또는 c 성분의 복소유전율을 나타내고 $\langle \epsilon \rangle$ 는 구하고자 하는 유효유전율이다. ϵ_h 는 주물질(host material)의 유효유전율, L_i 는 각 직교좌표방향의 편극소거인자(depolarization factor)를 나타낸다. 위의 편극소거인자들은 Aspnes의 차폐상수(screening parameter) y_i 와 다음과 같이 관계된다[13].

$$y_i = \frac{1}{1/L_i - 1} \quad (6)$$

주물질의 유전상수인 ϵ_h 는 유효매질이론의 선택에 따라 결정된다. 즉 Bruggeman 이론에 의하면 $\epsilon_h = \langle \epsilon \rangle$, Maxwell Garnett의 식은 Maxwell Garnett 이론의 유형에 따라 $\epsilon_h = \epsilon_a$ 또는 $\epsilon_h = \epsilon_b$ 또는 $\epsilon_h = \epsilon_c$ 이다. 그리고 Lorentz-Lorenz의 식은 $\epsilon_h = 1$ 과 같이 뚝으로써 얻을 수 있다. 본 연구에서는 아래와 같은 편극소거인자를 사용한 BEMA(Bruggeman effective medium approximation)를 사용하였다.

$$L = L_1 = L_2 = L_3 = 1/3 \quad (7)$$

측정된 타원해석 스펙트럼을 분석하여 박막구조상수들(박막의 두께, 박막내 각 성분의 조성비 등)이나 구성물질의 광학상수들을 결정하는 모델링과정에서 사용된 오차함수는 아래식과 같다[14].

$$\sigma = \frac{1}{1-p-1} \left[\sum_{i=1}^N (\alpha_{i,exp} - \alpha_{i,cal})^2 + (\beta_{i,exp} - \beta_{i,cal})^2 \right]^{1/2} \quad (8)$$

여기서 N 은 실험 데이터의 갯수, p 는 미지상수의 갯수이다. 타원해석 관련식들은 극도로 비선형적이고 이 오차함수를 극소화할 수 있는 일반적인 해석적인 방법이 없기 때문에 이 오차함수를 극소화하기 위해 합리적인 범위내에서 각 상수에 대한 격자탐사(grid search)를 행한 다음 오차함수가 최소가 되는 격자점(mesh point)에서 선형회귀분석법(linear regressional analysis)을 적용하였다. 이 방법은 극소점(local minima)에 갇혀 버릴 위험을 최소화할 수 있고, 반복되먹임을 함으로써 최적상수값에 빨리 수렴한다.

3. 실험 결과 및 논의

본 논문에서 측정된 SIMOX 시료는 산소 이온들을 200 keV의 에너지로 0.6×10^{18} ions/cm² 이온주입한 뒤, 약 1300°C 정도에서 열처리 한 실리콘이다. 그림 1에 나타난 이 시료의 분광타원해석 스펙트럼의 분석 결과로부터 이 시료가 SIMOX 구조를 갖는 것을 확인할 수 있었다. 타원해석 모델링에는 공기(매질)/제 1표면층(SiO₂)/제 2표면층(c-Si + a-Si)/제 3표면층(SiO₂)/계면층(c-Si + SiO₂)/기판(c-Si)의 광학적 박막구조를 사용하였으며, 이

광학적 모델에 따른 최적 층구조상수들(각 층의 두께, 각 층내 성분의 조성비)과 모델링에 따른 오차(unbiased estimator, σ)의 값들을 기관상의 측정위치들과 함께 표 1에 정리하였다.

제 2표면층을 결정성 실리콘만으로 이루어져 있다고 가정된 광학적 모델을 사용한 분석 결과의 σ 값들을 표 1에 나타낸 σ 값들과 비교해 보면 항상 후자가 작은 값을 갖는다. 이는 비교적 높은 온도에서의 열처리에도 불구하고 이온주입시 생성된 결함들이 모두 제거되어 실리콘이 재결정화되는 과정이 완벽하게 이루어지지 않았기 때문으로, 유사한 결함의 잔류 현상이 As⁺, P⁺, BF₂⁺ 이온들을 주입한 후 열처리 한 시료들에서도 관측되었다[15, 16]. 또한 제 2표면층에 포함된 비정질실리콘의 광학상수의 기준데이터로 완화된 비정질실리콘(r-a-Si)의 복소유전함수가 사용되었는데, 이 역시 열처리 후의 비정질 실리콘의 광학적 특성은 이온주입된 비정질실리콘과 다르다는 As⁺, P⁺, BF₂⁺ 주입 실리콘들의 열처리 효과 분석 결과와 일치한다[15-17]. 매물 산화층과 결정성 실리콘 기관 사이에 존재하는 계면층은 40% 이상의 SiO₂를 포함하며 두께가 300 Å 이상인 것으로 분석되었는데, 이는 이온주입에 의해 만들어진 SIMOX가 실리콘

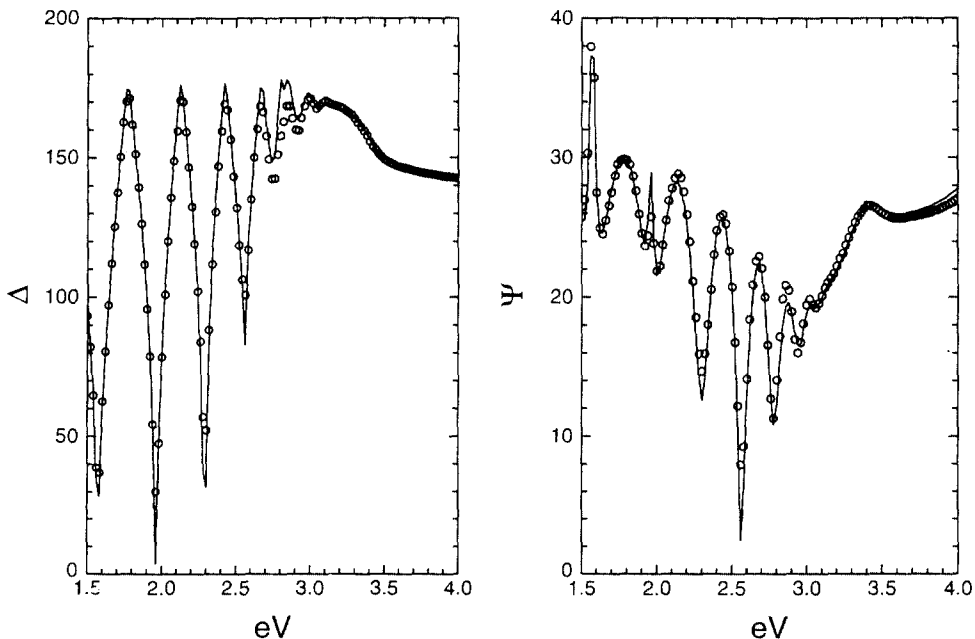


그림 1. SIMOX 시료의 분광 타원해석 스펙트럼(○)과 최적근사 스펙트럼(---). 이 스펙트럼은 기관상의 D위치(그림 3 및 관련 설명 참조)에서 측정되었으며, 모델링에는 공기(매질)/제 1표면층(SiO₂)/제 2표면층(c-Si + a-Si)/제 3표면층(SiO₂)/계면층(c-Si + SiO₂)/기판(c-Si)의 광학적 박막구조를 사용하였다.

표 1. SIMOX 시료의 분광타원해석법에 의한 표면층의 구조분석표. 타원해석 모델링에 사용된 광학적 박막구조는 공기(매질)/제 1표면층(SiO₂)/제 2표면층(c-Si+a-Si)/제 3표면층(SiO₂)/계면층(c-Si+SiO₂)/기판(c-Si)임

| 측정위치 | 층구조 | 제 1표면층 | | 제 2표면층 | | 제 3표면층 | | 계면층 | | σ |
|------|-----|--------|----------|------------|-----------|----------|----------------------|--------|--|----------|
| | | d(Å) | d(Å) | r-a-Si (%) | d(Å) | d(Å) | SiO ₂ (%) | | | |
| A | | 16±4.4 | 3340±5.0 | 5.35 | 767±70.7 | 354±43.5 | 42.74 | 0.0571 | | |
| B | | 21±4.2 | 3363±5.1 | 4.42 | 869±83.7 | 247±56.9 | 49.32 | 0.0567 | | |
| C | | 17±4.6 | 3390±5.3 | 4.64 | 856±101.5 | 203±63.3 | 48.90 | 0.0612 | | |
| D | | 16±3.6 | 3364±4.0 | 5.14 | 739±56.6 | 366±35.4 | 42.36 | 0.0464 | | |
| M | | 16±4.0 | 3371±4.5 | 5.41 | 798±62.2 | 322±31.2 | 37.17 | 0.0523 | | |

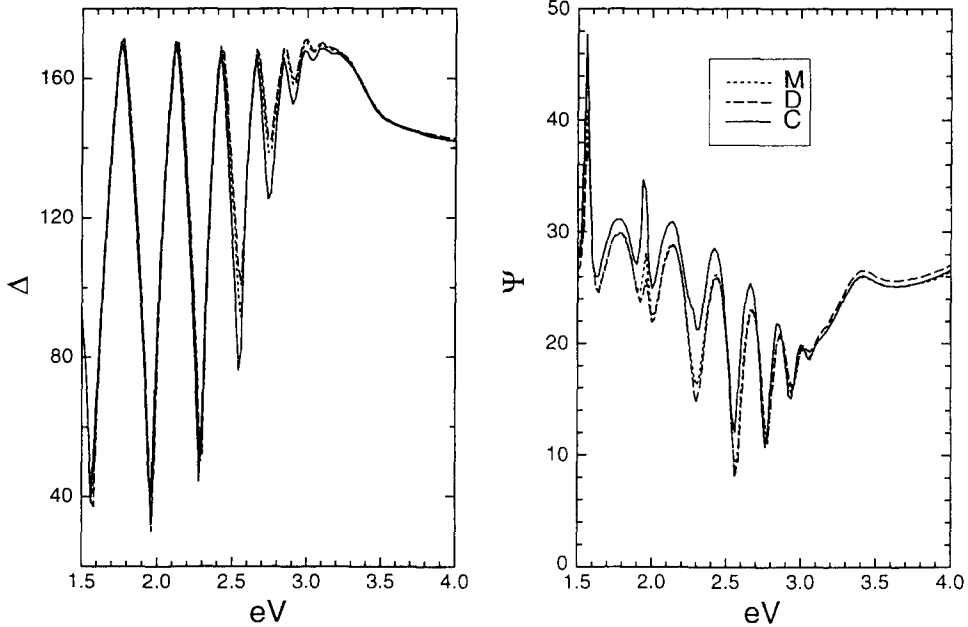


그림 2. SIMOX 층구조의 비균일성. 각각 기판상의 C위치, D위치, 그리고 M위치(그림 3 및 관련 설명 참조)에서 측정된 분광 타원해석 스펙트럼들은 서로간에 차이를 보이고 있다.

기판의 표면에 나타나는 자연 산화막이나 열적 성장 시킨 산화막의 특징적인 날카로운 계면과는 아주 다른 계면 형태를 갖고 있다는 것을 보여준다.

그림 2는 시료위의 서로 다른 위치(C, D, M)에서 측정된 분광 타원해석 스펙트럼들을 보이고 있다. 만약 이온주입과 열처리에 따른 매물 산화층의 형성이 균일하게 이루어졌다면 기판의 전 영역에서 측정된 분광 타원해석 스펙트럼들 사이에 큰 차이가 없어야 한다. 그런데 그림 2에 보인 분광 타원해석 스펙트럼들은 측정위치에 따라 다르게 나타나며 특히 ψ 스펙트럼들은 큰 차이를 보이고 있는데, 이는 SIMOX 시료가 비균일한 층구조를 갖기 때문이다. 본 논문에서는 시료위의 5곳에서 분광

타원해석 스펙트럼들을 측정하였는데, 각각의 측정 위치를 그림 3에 표시하였다. 그림 4는 위치 A, D와 B, C에서 측정된 ψ 스펙트럼들이 각각 거의 같은 형태로 나타남을 보이고 있는데, 이는 측정위치 A, D와 B, C에서 시료가 각기 유사한 SIMOX 층구조를 갖는 것을 의미한다. 결론적으로 그림 2와 4의 비교로부터 이 SIMOX 시료의 층구조에는 방향의존성이 있는 것을 알 수 있다.

각 측정 위치의 분광 타원해석 스펙트럼을 분석한 결과들을 표 1에 정리하였다. 이 표에서 보면 위에서 논의한 바와 같이 각각 A와 D, B와 C위치에서의 층구조상수들은 비슷하지만 C, D, 그리고 M 위치에서의 층구조

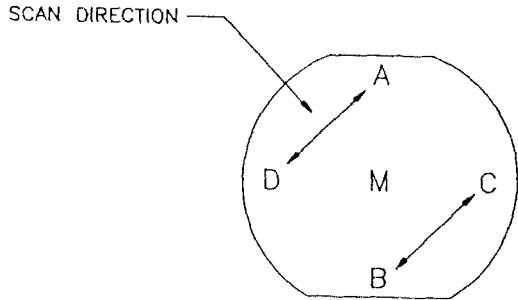


그림 3. 시료 위의 5곳의 분광 타원해석 스펙트럼 측정 위치와 이온빔 주사방향.

상수들은 서로 다른 것을 알 수 있다. 즉 이 SIMOX 시료의 층구조는 D-M-C 방향으로 비균일하며 A-D와 B-C 방향으로는 각기 균일한데, 이로부터 이 시료는 A-C(혹은 D-B) 방향으로 비균일한 이온빔을 그림 3에 나타난 것과 같이 A-D(혹은 C-B) 방향으로 주사시켜 만들었음을 알 수 있다.

그림 5에는 실리콘 기판에 200 keV의 에너지로 산소 이온들을 주입한 경우의 빈자리 분포와 이온 분포들을 TRIM'92로 전산시뮬한 결과를 보였다. 사용된 이온주입 조건하에서의 산소 이온의 평균 투사거리(range)는 4135 Å, 요동(straggle)은 883 Å이며 이온분포와 빈자리

분포의 최대치는 각각 ~4500 Å과 ~3800 Å의 깊이에 있다. SIMOX 구조 내의 매몰산화층은 열처리에 따른 주입된 산소 이온들의 재배치와 이어 지는 산화 작용에 의하여 형성되므로, 이러한 TRIM 전산시뮬 결과와 매몰산화층 분포와의 비교로부터 SIMOX 구조 형성 기구에 대하여 알 수 있다. 표 1의 분석결과를 보면 약 300 Å의 계면층과 800 Å의 매몰산화층이 3360 Å 정도의 결정성 실리콘층 아래에 생긴 것을 알 수 있다. 즉 매몰산화층은 최대 이온분포 깊이나 평균 투사거리보다 얇은 깊이에 생겼는데, 이는 열처리를 함에 따라 재배치되는 산소들의 이동이 결정성 실리콘 내부보다는 빈자리 분포가 큰 쪽으로 일어남을 뜻한다. 따라서 매몰산화층은 빈자리 분포가 최대인 ~3800 Å의 깊이 주변에 집중적으로 생기며, 특히 표면쪽에 분포하던 산소 이온들은 표면쪽의 상대적으로 큰 빈자리 분포 덕분에 이동이 용이하여 매몰산화층에 집중되고 제 2표면층(c-Si+a-Si)에는 SiO₂가 생기지 않는다. 이와 달리 기판쪽에 분포하던 산소 이온들은 내부의 상대적으로 작은 빈자리 분포 때문에 이동이 어렵워 매몰산화층에 집중되지 못하며, 그 결과 매몰산화층과 결정성 실리콘 기판 사이에 40% 이상의 SiO₂를 포함하는 두께가 300 Å 이상인 계면층이 존재하게 된다.

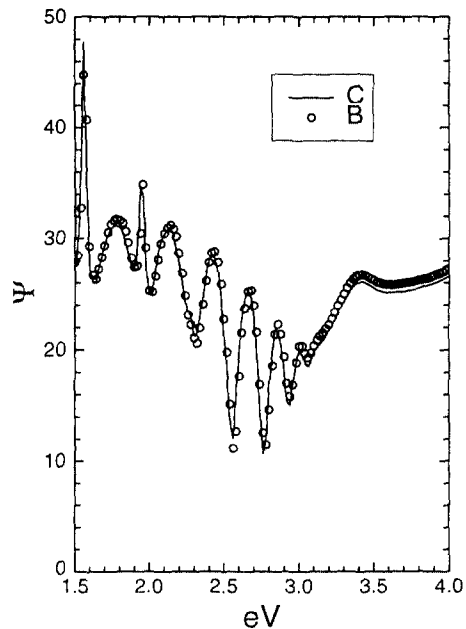
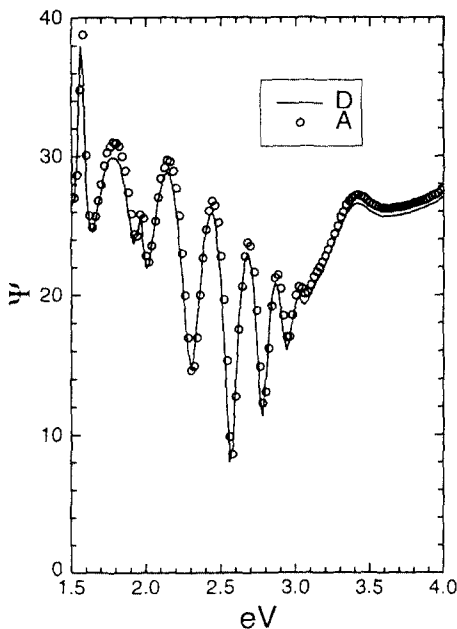


그림 4. SIMOX 층구조의 균일성. 기판상의 A, D위치와 C, B위치는 각각 거의 비슷한 타원해석 스펙트럼들을 보이고 있다.

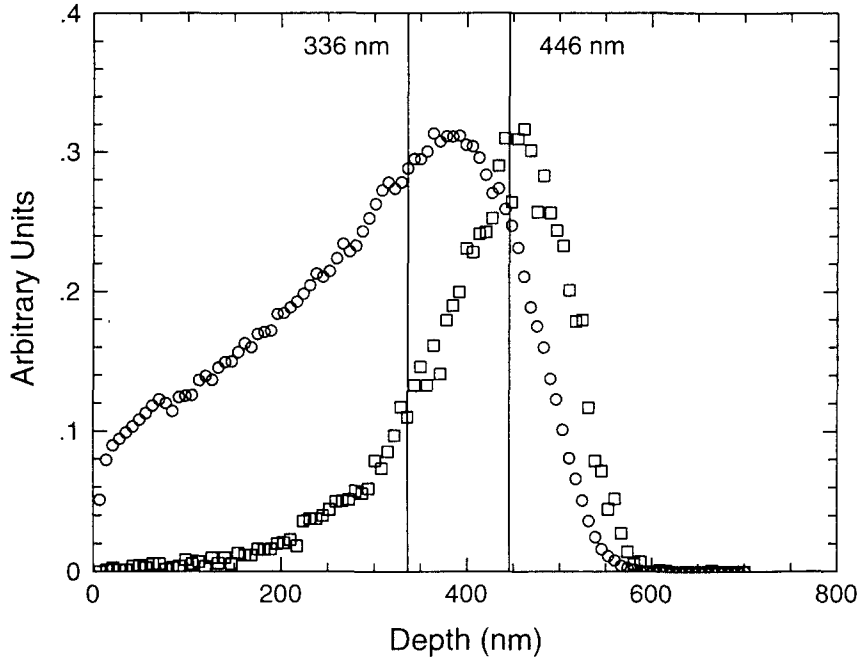


그림 5. 실리콘 기판에 200 keV의 에너지로 산소 이온들을 주입한 경우의 빈자리 분포(O)와 이온 분포(□)들을 TRIM'92로 전산시뮬한 결과. 깊이가 3360 Å과 4460 Å인 곳을 표시하였다.

4. 결 론

비파괴적인 분석 방법인 분광 타원해석법을 이용하여 200 keV의 에너지로 산소 이온들을 주입한 후 열처리하여 만든 SIMOX를 분석한 결과, 제 1표면층(SiO₂)/제 2표면층(c-Si+a-Si)/제 3표면층(SiO₂)/계면층(c-Si+SiO₂)/기판(c-Si)의 층구조를 갖는 것을 알 수 있었다. 높은 열처리 온도에도 불구하고 제 1표면층에는 약간의 잔류 결합이 있는 것으로, 또한 실리콘 기판과 매몰 산화층 사이에는 약 300 Å의 계면층이 있는 것으로 분석되었다. 매몰산화층은 ~3360 Å 정도의 결정성 실리콘층 아래에 ~800 Å 정도 형성되었는데, 이러한 매몰산화층의 형성은 열처리에 따른 주입된 산소 이온들의 재배치에 의하여 이루어진다. TRIM 전산시뮬 결과와 매몰산화층 분포의 비교는 산소 이온들이 이온 주입시 실리콘의 비정 질화가 최대인 곳 주변으로 이동함을 나타내고 있다. 또한 시료위의 측정 위치에 따라 분광 타원해석 상수들이 달라지는 것으로부터, 이온주입시의 이온빔의 형태와 주사 방향에 따라 SIMOX는 비균일한 층구조를 갖는 것을 알 수 있었다.

감사의 글

이 논문은 1995년도 아주대학교 교내연구비 지원을 받아 이루어졌음을 밝히며 감사드립니다.

참고문헌

1. R. F. Pinzotto, *J. Cryst. Growth* **63**, 559 (1983).
2. *Silicon-on-Insulator and Buried Metals in Semiconductors*, edited by J. C. Strum, C. K. Chen, L. Pfeiffer and P. L. F. Hemment, Mater. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 107 (Materials Research Society, Pittsburgh, 1988).
3. K. Izumi, M. Doken and M. Aritoshi, *Electron. Lett.* **14**, 593 (1978).
4. D. E. Aspnes, *SPIE* 946, 84 (1988).
5. R. M. A. Azzam and N. M. Bashara, *Ellipsometry and Polarized Light* (North-Holland, New York, 1977).
6. S. M. Sze, *VLSI Technology* (McGraw-Hill Book Company, 1983), Chap. 6.
7. J. Linhard, M. Scharff and H. Schiott, *Mat.-Fys.*

- Med. Dan. Vid. Selsk **33**, 1 (1963).
8. J. F. Gibbons, Proceedings of the IEEE **60**, 1062 (1972).
 9. O. S. Heavens, *Optical Properties of Thin Films* (Dover, New York, 1955), Chap. 4.
 10. R. Muller, Surf. Sci. **16**, 14 (1969).
 11. J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 2nd ed. (John Wiley & Sons Inc., New York, 1975), Chap. 7.
 12. 박광범, 신용환, 구교근, 이순일, 김상열, 오수기, 한국
진공학회지 **3**, 166 (1994).
 13. D. E. Aspnes, SPIE **276**, 188 (1986).
 14. S. Y. Kim and K. Vedam, Appl. Opt. **25**, 2013 (1986).
 15. 이창희, 이순일, 오수기, 김상열, 새물리 **34**, 682 (1994).
 16. 이창희, 이순일, 한국진공학회지 (투고중).
 17. 안희정, 이창희, 이순일, 오수기, 김상열, 새물리 **34**, 257 (1994).