

## 이온 산란 몬테칼로 계산에 의한 시료 물질의 스퍼터링

김영삼 · 이상석 · 김영권 · 최은하 · 조광섭

광운대학교 전자물리학과, 플라즈마 및 대전입자빔 연구실  
(1998년 10월 15일 접수)

### Sputtering of target materials by the ion scattering monte carlo calculation

Young-Sam Kim, Sang-Suk Lee, Young-Guon Kim, Eun-Ha Choi and Guangsup Cho

447-1, Wollgye, Nowon, Charged Particle Beam and Plasma Laboratory,  
Department of Electro-Physics, Kwangwoon University  
(Received October 15, 1998)

**요 약** - 입사 이온과 시료 핵과의 개별 산란 방식으로 이온 산란의 몬테칼로 프로그램을 제작하였다. 이 때 시료 원자의 산란 전단면적과 시료 원자들간의 거리는 시료 원자 밀도의 함수로 주어지는 실질적인 크기로 하여 개개의 시료 입자와의 충돌을 계산한다. 이 프로그램을 이용하여 입사 이온에 대한 시료 물질의 스퍼터링의 현상을 입사 이온과 시료와 관련된 변수들의 관계에 대하여 조사하였다. 입사 이온의 질량, 입사 이온의 에너지, 입사각에 따른 스퍼터링 수율과 시료면의 표면 결합에너지에 대한 수율의 변화, 그리고 스퍼터되는 원자의 에너지 분포를 해석하였다.

**Abstract** - Monte Carlo ion scattering program is improved with the single scattering methods where the total cross section and the mean free path are calculated as a function of atomic density during ion scattering in matter. The relations among the parameters of incident ions and substrate materials are investigated to the sputtering phenomena. The sputtering yield has been analyzed with the dependence on the incident ion species and energy, incident angle, and surface binding energy. The energy distribution of sputtered particles is discussed.

## 1. 서 론

이온 산란의 몬테칼로 계산은 반도체 제작공정에서 이온주입이나 스퍼터링의 연구와 관련하여 많은 관심을 가져왔다. 최근에는 국내에서 플라즈마 방전과 관련된 이온의 산란에 대한 연구가 요구되고 있다. 즉 플라즈마 평판 디스플레이(Plasma Display Panel)에서 기체상태의 입자들의 충돌과 관련하여 Monte Carlo 방법[1-2]에 의한 보다 개선된 연구를 필요로 하고 있다. 그리고 이차 전자의 방출[3] 및 MgO 보호막의 부식과 관련된 연구[4]와 플라즈마 잠김 이온주입(Plasma Immersion Ion Implantation)에 대한 연구도 대두되고 있다. 또한 21세기의 미래 핵융합에너지와 관련하여 KSTAR- 프로젝트 [6]에서는 용기 벽과 플라즈마 상호작용에 의한 불순물

문제의 연구에도 응용될 수 있다.

대표적인 몬테칼로 프로그램으로 국내외에 널리 소개된 것으로 TRIM(Transport of Ion in Matter)프로그램이 있다. 이는 1980년에 소개[7]된 이후로 TRIM.SP[8], TRIM85[9], TRIDYN[0], TRIDOS[1]등으로 새로운 편성과 변형 프로그램이 줄곧 소개 발표되었다. 그 외에도 MARLOWE[12], MARLOWE12[13]와 SASAMAL[14], PIBER[15]등 명명된 프로그램의 수만 하여도 약 40종이 있으며, 기타 개별 연구소별로 독자 개발하여 사용하는 것 등, 수많은 프로그램이 있다[16].

여기에서는 1996년도에 소개된 프로그램[17]을 새롭게 편성하여 MCIS(Monte Carlo Ion Scattering) 프로그램이라 명명하여 본 논문에 소개한다. 새로운 프로그램에서 계산 모델의 주요한 차이점은 산란 단면적을 원자

들간의 거리로 주어지는 면적으로 계산하여 시료의 개별 원자에 대한 산란을 계산하였다. 이 프로그램을 이용하여 스퍼터링의 현상에 대하여 자세한 분석을 하였다. 2절에서는 새로운 MCIS 프로그램의 일반적인 사항과 개정 내용을 소개하였다. 3절에서는 스퍼터링과 관련된 여러 가지 변수들의 영향을 조사하였다. 그리고 본 프로그램을 이용한 계산결과를 기존에 발표된 실험결과와 비교하였다. 새로운 프로그램을 이용하여 이온의 산란 영역(scattering range)과 산란의 편차를 계산하여 잘 알려진 실험치와 비교한 결과, 기존의 프로그램의 결과 보다 잘 맞는다. 특히 기존의 프로그램에서 산란 영역과 편차가 각각 실험치 보다 3.4~6.4%, 7~14% 정도로 작은 값을 보였으나 본 프로그램은 0.03~2.5%, 0.03~1.3% 이내로 근접한 값을 보여준다.

## 2. 몬테칼로 계산

MCIS 프로그램에서 시료에 입사한 이온 산란과 시료 원자의 산란 계산의 특징은 (i) 시료면을 비정질(amorphous)로 가정하고, (ii) 모든 입자는 3차원의 산란으로 계산되며, (iii) 단일원자 뿐만이 아니라 복합원자의 시료에서 계산되고, (iv) 단층 시료 및 다층(multi layer) 구조에 대하여 계산한다.

대부분의 몬테칼로 방식에 의한 이온 산란 프로그램은 결정성의 방향이 불규칙적인 무작위성을 갖는 비정질 시료를 다룬다. 특별히 결정성의 방향을 고려할 경우는 별도로 취급해야하며 본 프로그램에서는 이를 다루지 않는다. 입사이온이나 시료원자의 산란은 극각(polar angle)과 방위각(azimuthal angle)에 의한 3차원의 산란으로 계산된다. 입자의 산란은 핵 산란과 전자 산란으로 구분하여 계산한다. 따라서 입사 이온의 산란뿐만이 아니라 핵 산란에 의한 시료 원자핵의 산란도 계산된다. 이 때 단일 원자 시료의 산란뿐만이 아니라 복합 원자 시료에 대한 시료 원자들의 산란이 동시에 계산된다. 복합원자 시료에 대한 계산은 각 원자의 산란 단면적  $\sigma_i$ 와 각 원자의 밀도  $N_i$ 에 의하여 총 산란 단면적  $\sigma_T = \sum N_i \sigma_i$ 로 계산하고, 평균 주행거리는  $\Lambda_T = 1/\sigma_T$ 가 된다. 이 때의 피충돌입자는 복합 원자 각각의 산란 단면적의 비값에 따라서 확률적인 무작위 수에 의한 몬테칼로 방식으로 선택된다.

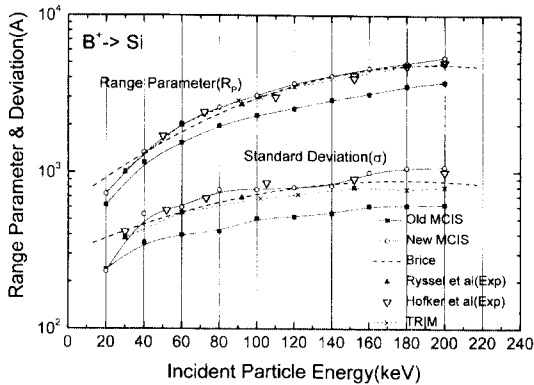
시료층 사이의 경계면의 처리는 흔히 사용하는 내사법을 사용하지 않고 계산의 정확성을 기하기 위하여 직

접 계산을 한다. 즉, 어떤 경계면에 입자가 도달하면 그 경계면에서 다른 시료로 입자가 입사하는 것과 같은 방식을 택한다. 계산 시간은 주로 입사 이온과 시료 물질의 종류에 따라서 다르다. 경계면 처리에 대해서 계산 시간을 비교해 보면 10000개의 이온이 입사했을 경우의 계산 시간을 1로 보면 약 5~10% 증가하는 경향을 보인다. 이것은 경계면에서의 충돌을 직접 계산하기 때문에 계산 시간이 더 소요된다.

본 프로그램에서의 계산 모델은 핵에 의한 탄성산란과 전자에 의한 비탄성 산란으로 구분된다. 핵산란은 LSS[18] 이론의 핵산란 미분단면적의 형태에서 만유산란 차폐함수[19]는 Kalbitzer와 Oetzmann[20]의 실험적으로 얻어진 상수값을 사용한다. 비탄성산란은 Fermi 속도 이하의 저에너지 영역은 Lindhard-Scharff의 저지능[21]을 사용하고 시료원자의 진동을 고려하여 실험치와 맞추어진 보정상수를 도입한다. 고에너지 영역은 Bethe와 Bloch의 저지능[22]을 사용하고 중간에너지 영역은 Andesen과 Ziegler가 제시한 내사법[23]을 사용한다.

기존의 프로그램인 Old-MCIS과 새로 개선한 프로그램인 New-MCIS의 차이점은 산란 단면적의 유일성(singularity)의 처리 방식이다. 일반적으로 산란단면적은 산란각  $\theta=0^\circ$ 에서는 유일성을 갖는다. 대부분의 몬테칼로 프로그램에서 이러한 산란단면적은 두 가지 방식 중 하나를 채택하고 있다. 하나의 방법은 최소 산란각  $\theta_{min}$ 을 임의의 적당한 값을 선택하는 것이다. 대개  $\theta_{min}=0.01^\circ$ 를 사용한다[24-26]. 또 다른 방법[8, 27, 28]은 산란 단면적을 원자와 원자간의 실제적인 크기를 고려하여 시료 밀도의 함수로 나타낸다. 즉, 단위 공간에서 하나의 원자가 차지하는 부피가  $1/N$ 이면, 단위 공간에서 원자의 전단면적은  $\sigma_T = 1/N^{2/3}$ 이다. 따라서 원자간의 거리를 산란의 평균주행거리로 하여  $\Lambda = 1/(N\sigma_T) = 1/N^{1/3}$ 가 된다. 시료의 원자 밀도에 의하여 전단면적이 주어지면  $\sigma_T = \int_{\theta_{min}}^{\pi} d\sigma$ 에 의하여  $\theta_{min}$ 이 정해진다. 이 때  $\theta_{min}$ 의 값은 원자밀도와 충돌입자의 에너지에 따라서 달라진다. 이러한 방식은 입자와 입자의 개별 충돌방식으로 계산하는 것이다. 10000개의 입자를 입사 시켰을 때의 계산 속도는 전자의 방식을 택하는 경우를 1로 보면, 후자의 경우는 20~30% 정도 계산 시간이 더 소요된다. 이러한 계산 결과와 실험치와 이론값들과의 비교결과를 Figs. 1-3에 나타내었다.

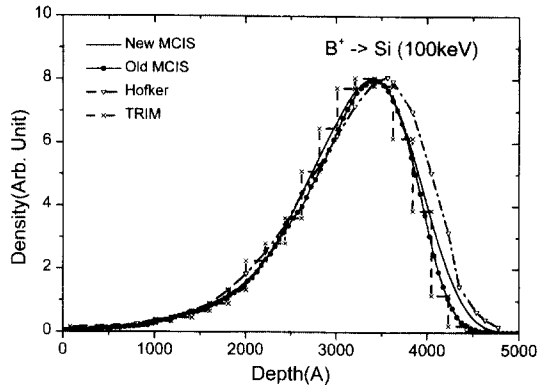
일반적으로 몬테칼로 방법을 이용한 이온 산란의 전산모사 결과는  $B^+$  이온을 Si-시료에 입사한 실험 및 이



**Fig. 1.** Si 시료에 20~200 keV의 Boron을 입사하였을 때 입사에너지에 대한 평균 투사 비거리( $R_p$ )와 표준편차( $\sigma$ )이다. 와는 각각 Old MCIS와 New MCIS 코드의 계산 결과이다. 는 Ryssel[33]의 실험결과이며 는 Hofker[32]의 SIMS 측정결과이다. 그리고 Brice[29]의 이론결과와 TRIM의 결과를 나타내었다. 모든 계산식에서 Lindhard-Scharff[31]의 전자저지능에 1.59배를 하였다.

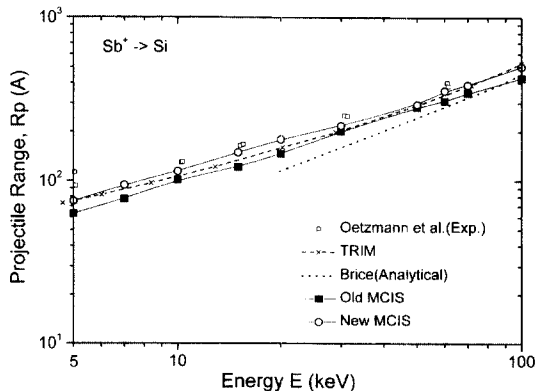
론의 자료와 비교한다. 그 이유는  $B^+ \rightarrow Si$ 에 대하여 투영거리의 분포에 대한 다수의 측정치가 각각 다른 방법의 실험결과로 보고되었기 때문이다. 특히, Brice[29]와 Gibbons[30]는 운동학 방법에 의한 투영거리와 통계에 대한 이론적인 예시와 함께 수리화한 표를 보고하였다. 그들은 모두 Lindhard-Scharff[31]의 저지능공식에서  $k/k_i = 1.59$ 로 수정하였다. 여기서도 이 값을 사용하여 에너지가 30~200 keV영역에 대한 투영거리( $R_p$ )와 표준편차( $\sigma$ )를 Fig. 1에 나타내었다.  $R_p$ 의 값은 이온이 입사하여 최종 정지한 위치(x,y,z)에서 입사방향에 대한 투영된 거리이다. 이는 수직입사인 경우는  $R_p = z$ 가 된다. 표준편차는 z축에 대한 분산으로서  $\sigma = \sqrt{\sum_i (x - x_i)^2 / N}$ 로

주어진다. Fig. 1에서 Hofker[32]와 Ryssel[33]의 실험결과 및 Brice의 이론결과와 TRIM의 전산결과를 나타내었다. MCIS의 결과는 Old-MCIS와 New-MCIS의 결과를 각각 ■와 ○로 나타내어 실선으로 연결하여 나타내었다. Brice[29]의 이론결과는 파선으로 표시하고 TRIM의 결과는 ×로 표시하여 파선으로 나타내었다. Fig. 1은 투영거리와 표준편차에 대한 이론치와 실험치의 결과 비교이다. 대개 Old-MCIS는 실험치와 투영거리는 3.4~6.4%, 표준편차는 7~14% 정도 작은 값으로 계산된다. 그러나 New-MCIS는 실험치와 투영거리는 0.03~2.5%, 표준편차는 0.03~1.3% 이내로 일치함을 보여준다. Old-MCIS보다 New-MCIS가 실험결과 및 다른



**Fig. 2.** 100 keV의 boron을 Si 시료에 입사하였을 때 입사 이온의 깊이에 대한 분포이다. MCIS의 계산결과는 각각 굵은 실선(-)과 가는 실선(-)으로 나타내었다. 파선은 Hofker[32]의 실험결과이고 TRIM의 결과는 히스토그램으로 나타내었다.

계산결과와 잘 맞는다. 다만 New-MCIS에서 20 keV이하의 낮은 에너지 영역에서 차이를 보인다. Fig. 2는 100 keV의 boron 이온을 실리콘 시료에 입사할 때의 투영거리의 분포이다. Hofker의 실험결과에 비하여 MCIS나 TRIM의 결과가 약간 왼쪽으로 치우쳐 있으나 전반적인 경향은 크게 벗어나지 않는다. Oetzmann[34]은 보다 정밀한 입사 거리의 측정을 입사 이온의 저에너지 영역에까지 확장하여 측정하였다. 즉 Sb 이온의 에너지 5 keV~100 keV 를 Si시료에 입사하였다. Fig. 3은  $Sb^+$  이온을 Si 시료에 입사한 경우의 투영거리에 대한 실험치와 이론치의 비교이다. Brice의 이론치와 TRIM



**Fig. 3.** Si 시료에  $Sb^+$  이온을 입사하였을 때의 투사 비거리이다. 네모(□)는 Oetzman[32]의 실험결과이고, 가는 파선은 TRIM의 결과이며, 그리고 굵은 파선은 Brice[29]의 이론 결과이다.

결과와 함께 Old-MCIS와 New-MCIS를 나타내었다. TIRM의 결과는 실험치에 비하여 비거리에서 10~20% 정도 낮게 나타났다. 또한 Old-MCIS는 TRIM보다 더 낮으나 New-MCIS는 실험치보다 5~10% 정도 작지만 상당히 근접하고 있으며, 다만 낮은 에너지 (~5 keV) 영역에서는 이론치들이 실험치와 다소의 차이를 보인다.

### 3. 스퍼터링 수율 계산 결과 및 분석

본 연구에서는 스퍼터링과 관련된 여러 가지 변수들의 영향을 조사하고, 그 계산 결과를 실험결과와 비교하여 스퍼터링의 특성을 분석한다. 시료에 입사한 이온은 시료의 개개 입자들과 쿨롱작용에 의해 충돌하며 산란된다. 이러한 산란 과정에서 입사 이온의 운동에너지를 시료입자에 전달하게 되고 이 에너지를 가지고 시료 핵원자도 산란된다. 이때 시료의 핵원자에 전달된 에너지가 시료내부의 결합력 이상일 때 시료 내부에서 운동하게 된다. 이러한 이차 입자의 운동은 시료의 또 다른 원자핵과 충돌하고 동시에 많은 전자들과 비탄성 충돌(ineleastic collision)을 하며 에너지를 잃는다. 이렇게 시료내부를 산란하던 입자가 시료 표면에 도달해서 표면 결합력 이상을 갖게 되면 이차 입자는 표면으로부터 스퍼터되어 나온다. 스퍼터 현상에 정성적으로 영향을 주는 기본적인 물리량은 입사이온의 에너지, 입사각, 그리고 표면결합에너지 등에 관계하게되며, 이들의 스퍼터링 수율(sputtering yield)의 정량적인 값의 변화에 미치는 영향과 스퍼터된 입자의 에너지 분포의 특성을 계산하여 분석한다.

#### 3.1 입사이온의 에너지 의존성

Fig. 4는 입사 이온의 에너지에 대한 스퍼터링 수율이다. 입사 이온인 수소(H), 중수소(D), 헬륨(He), 네온(Ne), 아르곤(Ar), 제논(Xe) 등이 니켈(Ni) 시료에 입사될 때 입사 이온에 대한 니켈의 스퍼터링 수율에 대한 계산결과를 실험결과와 비교하였다. 수소이온의 경우 Kenknight[42], Bohdanský[43], Bay[44], Roth[45]의 실험결과를 ▲로, 중수소는 Roth[29]의 결과를 ▼로, 헬륨은 Rosenberg[39], Fetz[41], Bay[44]의 실험결과를 ◆로, 네온은 Laegreid[35], Almen[36], Weijenfeld[37]의 실험결과를 ●로, 아르곤은 Laegreid[35], Almen[36], Fert[41], Stuart[40], Fetz[41], Bay[44]의 실험결과를 ■로, 제논은 Almen[36], Rosenberg[39], Fetz[41], Bay[44], Roth[45]의

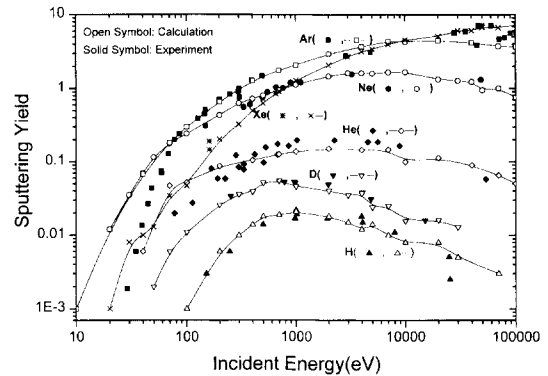


Fig. 4. 입사 이온의 에너지에 대한 스퍼터링 수율이다. 입사 이온인 수소(H), 중수소(D), 헬륨(He), 네온(Ne), 아르곤(Ar), 제논(Xe) 등이 니켈(Ni) 시료에 입사될 때 입사 이온에 대한 니켈의 스퍼터링 수율에 대한 계산결과를 실험결과와 비교하였다. 수소이온의 경우 Kenknight[42], Bohdanský[43], Bay[44], Roth[45]의 실험결과를 ▲로, 중수소는 Roth[29]의 결과를 ▼로, 헬륨은 Rosenberg[39], Fetz[41], Bay[44]의 실험결과를 ◆로, 네온은 Laegreid[35], Almen[36], Weijenfeld[37]의 실험결과를 ●로, 아르곤은 Laegreid[35], Almen[36], Fert[41], Stuart[40], Fetz[41], Bay[44]의 실험결과를 ■로, 제논은 Almen[36], Rosenberg[39], Fetz[41], Bay[44], Roth[45]의 실험결과를 \*로 각각 표시하였다. 계산 결과는 각각의 표시를 실선으로 연결하였다. 수소이온의 경우 ▲로, 중수소는 ▼로, 헬륨은 ◆로, 네온은 ○로, 아르곤은 □로, 제논은 ×로 표시하여 실선으로 연결하였다.

실험결과를 \*로 각각 표시하였다. 계산 결과는 각각의 표시를 실선으로 연결하였다. 수소이온의 경우 ▲로, 중수소는 ▼로, 헬륨은 ◆로, 네온은 ○로, 아르곤은 □로, 제논은 ×로 표시하여 실선으로 연결하였다.

가벼운 이온의 경우, 수율의 최고치가 1 keV 보다 작은 영역에서 포화되는 경향을 보인다. 무거운 이온 입자의 경우, 10 keV 이상 부근에서 수율 최고치를 나타내고 더 큰 에너지 영역에서는 감소하는 경향을 보여주고 있다. 일반적으로 입사이온이 시료 원자핵에 탄성충돌에 의하여 전달하는 에너지는 입사 이온 질량의 시료 원자에 대한 질량수의 비에 따라서 달라진다. 질량수비가 보다 작은 시료 원자보다 가벼운 이온이 입사할 경우, 질량수 비가 1에 가까워질수록 시료 원자에 전달되는 에너지가 증가한다. 시료원자보다 무거운 이온이 입사할 경우, 질량수 비가 커질수록 충돌에 의하여 전달되는 에너지가 감소한다. 이러한 현상은 그림에서 확인된다. Fig. 4에서 니켈(Ni)보다 질량수가 작은 수소(H), 중수소(D), 헬륨(He), 네온(Ne), 아르곤(Ar)의 순으로 수율이

증가함을 볼 수 있다. 이는 질량수 비가 1이하인 경우 스퍼트 수율은 시료 원자에 전달되는 에너지가 클수록 크다. 즉 질량수 비가 1에 가까운 이온일수록 시료원자에 큰 에너지를 전달하여 시료 원자의 스퍼터 수율이 커진다. 반면에 질량수 비가 1 이상인 제논(Xe)의 경우는 질량의 증가율 만큼 수율이 증가하지 않음을 보여준다. 특히 이들의 경우는 저에너지 영역에서는 네온(Ne)의 수율과 거의 같은 값을 갖는다.

### 3.2 입사각의 의존성

Fig. 5는 수소이온(H+)을 니켈(Ni)에 입사하였을 때 입사각에 따른 수율을 실험결과[45]와 비교하였다. 입사각은 시료 표면과 직각방향의 입사선에 대한 각이다. 입사 이온의 에너지는 1 keV, 0.4 keV, 0.2 keV이며 각각을 ●, ▲, ▼으로 표시하였다. 입사각은 0°에서부터 87°로 변화하고, 에너지가 1 keV일 때의 반사율(reflection coefficient)을 □으로 표시하였다. 반사율은 우측 좌표축에 해당한다. 실험결과[45]는 입사에너지가 1 keV일 때이고, ⊞으로 표시하였다. 실험결과와 계산결과가 1 keV의 에너지에서 대체적으로 잘 맞는 경향을 보이거나 75° 이상의 영역에서는 계산 결과가 다소 크게 나타난다. 그 이유는 계산결과는 시료 표면을 평탄면으

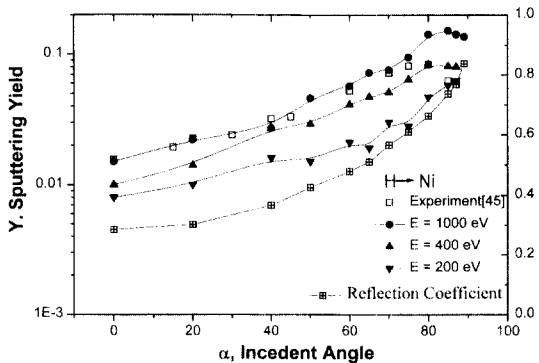


Fig. 5. 수소이온(H+)을 니켈(Ni)에 입사하였을 때 입사각에 따른 수율의 변화이다. 입사각은 시료 표면과 직각방향의 입사선에 대한 기울어진 각이다. 입사 이온의 에너지는 1 keV, 0.4 keV, 0.2 keV이며 각각을 ●, ▲, ▼으로 표시하였다. 입사각은 0°에서부터 87°로 변화하고, 에너지가 1 keV일 때의 반사율(reflection coefficient)을 □으로 표시하였다. 반사율은 우측 좌표축값에 해당한다. 실험결과[29]는 입사에너지가 1 keV일 때이고, ⊞으로 표시하였다. 실험결과와 계산결과가 1 keV의 에너지에서 대체적으로 잘 맞는 경향을 보이거나 75° 이상의 영역에서는 계산 결과가 다소 크게 나타난다.

로 가정하고 계산하게 되므로 각도가 커짐에 따라 반사율과 관계하여 수율이 계속 증가하는 경향을 보이나, 실제적인 시료 표면은 표면의 거칠도(surface roughness)가 있고 이로 인하여 효과적으로 입사이온의 입사각이 변화된 것으로 예측된다. 입사 이온의 에너지가 작으면 시료 입자에 전달되는 에너지가 작으므로 적은 에너지를 전달받은 시료 입자는 표면을 탈출하지 못한다. 따라서 입사 에너지가 적으면 수율이 작은 값을 갖는다. 대체적으로 입사각이 증가하면 수율은 증가한다. 대개 50° 이하에서는 증가율이 작고 50° 이상에서 상대적으로 증가율이 커져서 75° 이상 영역에서 감소현상을 보인다. 이러한 현상은 반사율이 수율의 경향 변화가 일어나는 영역에서 급격히 그 기울기가 변한다. 결국 반사율이 특정 값 이상일 때 수율의 감소를 보이고 있다. 이것은 대부분의 스퍼트 입자의 시료 내부의 초기위치가 표면에 가까이 있다고 생각하면[8], 각도가 커질수록 표면근처의 입자들과 충돌할 확률이 커지고 수율을 증가시키게 된다. 그러나 Fig. 5와 같이 일정한 입사각 이상에서 반사율이 급격히 증가하여 입사 이온의 시료 내부에서의

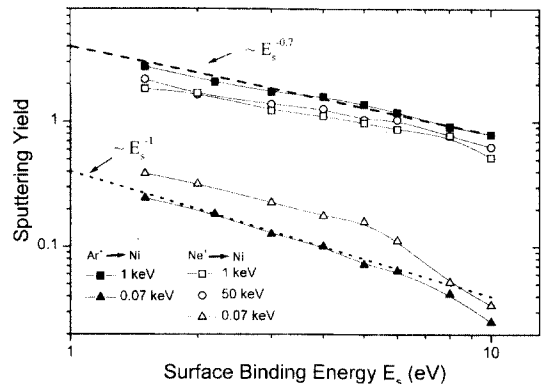


Fig. 6. 니켈(Ni) 시료에 아르곤이온(Ar+)과 네온이온(Ne+) 이온 각각을 입사하여 니켈 시료 표면결합에너지(surface binding energy)가 1.5 eV에서 10 eV 영역에 대한 스퍼터링 수율을 나타낸다. Fig. 4에서 Ar과 Ne에 대하여 최대 수율을 얻는 에너지보다 작은 에너지 영역인 1 keV와 반대로 큰 에너지 영역인 50 keV에서의 수율, 그리고 최소의 임계 에너지 값에서의 수율을 나타내었다. 아르곤이온(Ar+)의 경우 입사 이온의 에너지가 1 keV 일 때는 ■으로, 임계 에너지인 0.07 keV 일 때는 ▲으로 각각 표시하였고, 네온이온(Ne+)의 경우 에너지가 1 keV 일 때는 □으로, 50 keV 일 때는 △으로, 임계 에너지인 0.07 keV 일 때는 △으로 표시하였다. 스퍼터 수율의 결합에너지에 대한 함수 관계를 파선으로 나타내었다. 임계 에너지 근처의 에너지 값인 0.07 keV의 경우, 수율의 표면 결합에너지(E)에 따른 변화는  $E_s^{-1}$ 에 비례[8]하여 감소함을 보이고 있다.

산란이 감소하고 입사 이온이 곧바로 표면으로 빠져 나오기 때문에 입사이온과 시료입자들과의 충돌 회수가 줄어들어 수율의 감소를 가져온다.

### 3.3 표면결합에너지 의존성

Fig. 6는 니켈(Ni) 시료에 아르곤 이온(Ar+)과 네온 이온(Ne+)이온을 입사할 때 니켈 시료 표면결합력(surface binding energy)이 1.5 eV에서 10 eV 영역에서의 스퍼터링 수율이다. Fig. 4에서 Ar과 Ne에 대하여 최대 수율을 얻는 에너지보다 작은 에너지 영역인 1 keV와 반대로 큰 에너지 영역인 50 keV에서의 수율, 그리고 최소의 임계 에너지 값에서의 수율을 나타내었다. 아르곤 이온(Ar+)의 경우, 입사 이온의 에너지가 1 keV 일 때는 ■으로, 임계 에너지인 0.07 keV 일 때는 ▲으로 각각 표시하였다. 네온이온(Ne+)의 경우, 에너지가 1 keV 일 때는 □으로, 50 keV 일 때는 ○으로, 임계 에너지인 0.07 keV 일 때는 △으로 표시하였다. 임계 에너지 근처의 에너지 값인 0.07 keV의 경우, 수율의 표면 결합 에너지( $E_s$ )에 따른 변화는  $E_s^{-1}$ 에 비례하여 감소함을 보이고 있다. 그러나 최고 수율을 나타내는 에너지 영역 근처에서는  $E_s^{-0.7}$ 에 비례하는 경향을 보이고 있다. 즉 입사 에너지가 작은 경우는  $E_s^{-1}$ 의 이론[8]에 강하게 관계하고 입사 에너지가 클수록  $E_s^{-1}$ 에 약하게 관계한다. 이와 같이 표면 결합 에너지가 클수록 수율은 결합 에너지에 반비례함을 보여준다. 즉, 입사 에너지의 크기가 수율의 변화에 미치는 영향보다는 결합에너지의 크기 변화가 수율의 변화에 더 크게 작용한다.

### 3.4 스퍼터 입자의 에너지 분포

Fig. 7은 네온을 니켈에 입사할 때 스퍼터되는 니켈의 에너지 분포이다. 입사 이온의 에너지는 각각 50 eV, 1 keV, 100 keV이다. 스퍼터되는 입자의 에너지 분포는 대개 시료 표면의 결합에너지 영역( $E_s = 4.5$  eV) 이하에서는 증가하다가 그 이상에서는 급격히 줄어드는 것을 보여준다. Tompson[46]의 해석에 의하면 대개 표면결합 에너지의 1/2의 값에서 최대치를 갖고 이후에는 스퍼터된 시료원자의 에너지  $E$ 에 대하여  $E^{-n}$ 의 함수형으로 감소하며,  $n=2$ 인 값 이하의 에너지 분포형태를 갖는 것으로 보고되었다. 또한 Biersack *et al.*[8]은  $n=5/3$ 의 값을 보였다. Fig. 7에서의 에너지 분포는 입사에너지가 50 eV인 경우는 Ni의 표면 결합에너지  $E_s = 4.5$  eV의 절반 근처에서 최대치를 보이며, 입사에너지가 1 keV와 100

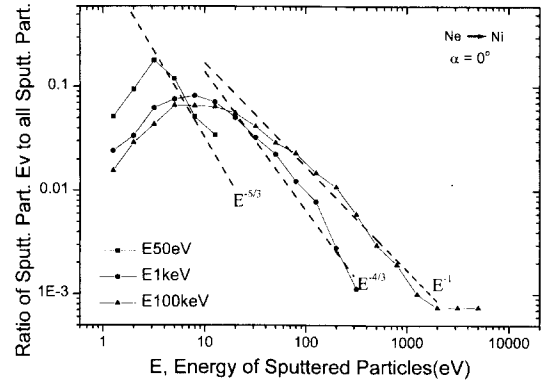


Fig. 7. 네온을 니켈에 입사할 때 스퍼터되는 니켈의 에너지 분포이다. 입사 이온의 에너지가 각각 50 eV, 1 keV, 100 keV를 나타내었다. 스퍼터되는 입자의 에너지 분포는 대개 시료표면의 결합에너지 영역 이하에서는 증가하다가 그 이상에서는 급격히 줄어든다.

keV 일 때는 표면결합에너지 보다 작은 값에서 포화되며 입사 에너지에 따라서 대개  $n=5/3, 4/3, 1$ 의 값을 보여준다. 이들을 Fig. 7에서 각각 점선으로 표시하였다. 이와 같이 스퍼터되는 시료 이온의 에너지는 입사이온의 에너지의 값에 크게 의존하지 않으며 대개 표면결합 에너지의 1/2이나 표면결합에너지 값의 영역에 해당하는 이온이 주로 스퍼터 된다. 다만 입사 이온의 에너지가 클수록 에너지 분포가 넓게 나타난다.

## 4. 결 론

이온 산란의 몬테칼로 방식의 전산모사에서 산란 단면적을 실제 시료에서의 원자가 차지하는 크기로 하고 평균 주행거리를 시료 원자들간의 실질적인 간격으로 하여 입사 이온과 시료 원자핵의 개별 충돌에 의한 산란 계산을 하였다. 본 프로그램을 이용하여 스퍼터링 수율의 특성을 조사하였다. 입사 이온의 에너지가 증가하면 수율이 증가하지만 특정한 입사 에너지값 이상에서 수율이 포화되고 감소하는 경향을 갖는다. 일반적으로 입사 이온의 질량과 시료 이온의 질량비가 1에 가까울수록 스퍼터링 수율이 큰 값을 갖는다. 이 때 입사 이온의 질량이 클수록 수율은 증가하지만 입사 이온의 시료 원자에 대한 질량비가 1보다 큰 경우는 수율의 증가가 반드시 질량에 비례 하지는 않는다. 입사이온의 입사각이 증가할수록 수율이 증가하지만 대개  $50^\circ$  이내의 입사각에서는 수율의 증가율이 적고 특정한 각에서 최대치를

가지며 그 이상의 값에서는 급격히 줄어든다. 시료 표면의 결합에너지의 증가에 따라서 대개 수율과 역비례 관계가 있음을 확인하였다. 이러한 관계는 입사에너지가 작을 때는 역비례가 강하며 입사에너지가 크면 결합에너지에 대하여 1보다 작은 지수값으로 역비례한다. 스퍼터되는 시료 이온은 대개 표면의 결합에너지의 영역에 해당하는 에너지를 가지고 스퍼터되는 이온이 가장 많다. 그리고 결합에너지 이상을 갖는 스퍼터된 시료 이온의 수는 스퍼터된 이온의 에너지에 대하여 대개 지수  $n$ 의 함수 형태로 줄어든다.  $n$ 은 2이하의 값을 갖는다. 또한, 스퍼터되는 입자의 에너지는 대부분 시료의 표면 결합에너지의 크기를 갖고, 입사 이온의 에너지 값에 크게 의존하지 않는다.

### 감사의 글

본 연구는 기초과학지원연구소의 “한 빛 이용자 육성 프로그램(과제번호P99013)”의 지원으로 수행되었습니다.

### 참고문헌

- J.P. Boeuf and E. Marode, *J. Phys. D* **15**, 2169 (1982).
- D.B. Grave and K.F. Jensen, *IEEE Trans. on Plasma Science* PS-14, 78 (1986).
- H.D. Hagstrum, *Phys. Rev.* **96**(2), 336 (1954).
- O. Sahniad C. Lanza, *J. Appl. Phys.* **47**, 1337 (1976).
- M. A. Lieberman and A. J. Lichtenberg, *Principles of plasma Discharges and Material Processing* (John Wiley & Sons, Inc., Ny, 1994), chap. 16.
- 기초과학지원연구소 핵융합연구개발사업단, 차세대 초전도 핵융합 연구장치 개발사업 (1997).
- J.P. Biersack and L.G. Haggmark, *Nucl. Instrum and Methods*, **174**, 257 (1980)
- J.P. Biersack, W. Eckstein, *Appl. phys.* **34**, 73 (1984).
- J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark, In the stopping and Range of Ions in Solids, The Stopping and Range of Ions in Matter, Vol. 1, ed. by J.F. Ziegler (Pergamon, NY. 1985).
- W. Miller. W. Eckstein, J.P. Biersack, *Comput. Phys. Commun. SI*, 355 (1988).
- P.S. Chou, N.M. Ghoniem, *J. Nucl. Mater.* **141-143**, 216 (1986).
- M.T. Robinson, I.M. Torrens, *Phys. Rev.* **B9**, 5008 (1974).
- M.T. Robinson, *Phys. Rev.* **B40**. 10717 (1989).
- Y. Miyagawa, S. Miyagawa, *J. Appl. Phys.* **54**, 7124 (1983).
- I. Adesida, L. Kara. Piperis, *Radiat. Eff.* **61**, 223 (1982).
- W. Eckstein, *Computer Simulation of Ion-solid Interactions*(Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1991), Chap. 7.
- 조광섭, *J. Kor. Vacuum Society*, **5**(4), 292 (1996).
- J. Lindhard, M. Scharff and H.E. Schiott, *Mat. Fys. Medd. Dan.* Viden 33 (1963).
- K.B. Winterbon, P. Sigmund, J. B. Sanders, *Mat. Fys. Medd. Dan.* **37**(14), (1970).
- H. Oetzmann, A. Feuerstein, H. Grahmann, S. Kalbitzer, *Phys. Lett.* **55A**, 170 (1975); A. Feuerstein, S. Kalbitzer, H. Oetzmann, *Phys. Lett.* **51A**, 165 (1975).
- J. Lindhard, M. Scharff, H.E. Schitt, *Mat. Fys. Medd.*, **33**, 14 (1963); J. Lindhard, V. Nielson, M. Scharff, P. V. Thomson, *Mat. Fys. Medd.*, **33**, 10 (1963); J. Lindhard, V. Nielson, M. Scharff, *Mat. Fys. Medd.*, **36**, 10 (1968).
- F. Bloch, *J. Phys.* **81**, 363 (1933).
- H. Andersen and J. Ziegler, *Hydrogen Stopping Powers and Ranges in All Elements* (Pergamon Press, New York, 1977) Vol. 3.
- T. Ishitani, R. Shimizu and K. Murata, *Japanese Journal of Applied Physics*, **11**, 125 (1972).
- T. Ishitani, A. Shimase and S. Hosaka, *Japanese Journal of Applied Physics*, **22**, 329 (1983).
- Y. Miyagawa, Y. Ato and S. Miyagawa, *Japanes Journal of Applied Physics*, **23**, 1482 (1984).
- I. Adesida and L. Karapiperis, *Radiation Effect*, **61**, 223 (1982).
- J.P. Biersack, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, **B27**, 21 (1987).
- D.K. Brice, *Ion implantation range and energy deposition distribution* (IFI/Plenum, NY, 1975).
- J.F. Gibbons, W.S. Johnson. and S.W. Mylroie, *Projected range statistics* (Dowden, Hutchinson and Ross, Inco, stroundsbung, Pa., 1975).
- J. Lindhard. and N. Schanff, *Phys. Rev.* **124**, 128 (1961).
- W.K. Hofker, D.P. Oosthock, N.J. Koeman. and H. A.M. DeGreefe, *Rad. Eff.* **24**, 223(1975).
- H. Ryssel, H. Kramz, K. Muller, R. A. Henkelmann and J. Biersack, *Appl. Phys. Lett.* **30**, 399 (1977).
- H. Oetzmann, A. Fenerstein. H. Grahmann and S. Kalbitzer, *Phys. Lett.* **55A**, 170 (1975).
- N. Laegreid, and G.K. Wehner, *J. Appl. Phys.* **32**,

- 365 (1961).
36. O. Almén and G. Bruce, *Nucl. Instrum. Methods* **11**, 257 (1961).
37. C.H. Weijnsfeldm, *Physica* **27**, 763 (1961).
38. C. Fert, N. Colombie, B. Fagot, Pham van Chuong: In *Le Bombardement Ionique* (CNRS, Paris 1961) p. 67.
39. D. Rosenberg and G.K. Wehner: *J. Appl. Phys.* **33**, 1842 (1962).
40. R.V. Stuart and G.K. Wehner, *J. Appl. Phys.* **33**, 2345 (1962).
41. H. Fetz and H. Oechsner, In *Comptes Rendus 6e Conf. Intl. Phnomnes d'Ionisations dans les Gaz*, Vol. II ed. by P. Hubert, E. Cremieu-Alcan (Paris 1963) p. 39.
42. C.E. Kenknight and G.K. Wehner, *J. Appl. Phys.* **35**, 2345 (1962).
43. J. Bohdansky, H.L. Bay, and J. Roth, In *Proc. 7th Intl. Vac. Cong. & 3rd Intl. Conf. on Solid Surfaces*, ed. by R. Dobrozemsky, F. Rudenauer, F.P. Viehbock, and A. Breth (Dobrozemsky, Vienna 1977) p. 1389.
44. H.L. Bay, J. Bohdansky, and E. Hech, *Radiat. Eff.* **41**, 77 (1979).
45. J. Roth, J. Bohdansky, and W. Ottenberger, IPP-Report 9/26, Garching. FRG (1979).
46. M.W. Thompson, *Philos. Mag.* **18**, 377 (1968).