

김연권, 김영삼, 최은하, 강승언, 조광섭
 광주대학교 전자물리학과, 플라즈마 및 대전입자빔 연구실

I. 서론

그 동안 이온산란의 몬테칼로 프로그램은 반도체 제작공정에서의 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 : PDP)에서 기체상태의 입자들의 충돌과 관련하여 Monte Carlo 방법에 의한 보다 개선된 연구를 필요로 하고 있다. 그리고 이차전자의 방출 및 MgO 보호막의 수율과 관련된 연구와 플라즈마 잠김 이온주입(Plasma Immersion Ion Implantation : PIII)에 대한 연구도 대두되고 있다. 또한 21세기의 미래 핵융합에너지와 관련하여 KSTAR- 프로젝트에서는 용기벽과 플라즈마 상호작용에 의한 불순물 문제의 연구에도 응용될 수 있다.

II. MCIS 프로그램

이온이 시료에 입사하여 시료내에서 3차원적인 공간 산란을 기술한다. 그리고 시료는 평면상에 원자가 있는 이상적인 평탄면과 그러한 면에 무작위로 위치한 원자들의 면으로 가정한다. 이러한 면에 대하여 비정질(amorphous)을 전제로 한다. 어떤 입자의 평균 주행비거리는 시료의 원자들의 밀도(N)를 고려하여 $\lambda = N^{-1/3}$ 으로 한다. 이를 근거로 종전의 탄성충돌 단면적과의 관계로 주어지는 주행 비거리를 수정하였다. 따라서 입자의 운동 중에 충돌은 입자간의 실제의 거리에 의해 주어지므로 보다 산란의 정확도를 기한다. 또한 산란 전단면적(σ_T)도 $\sigma_T = N^{-2/3}$ 으로 한다. 이는 종전에 산란각의 최소치를 임의로 택하여 산란 전단면적을 결정하는 것을 수정하였다. 그외에 산란각을 결정하는 미분산란단면적은 만유산란함수(universal scattering function)에서 3개의 변수는 실험검증을 통해 얻어진 Kalbizer 와 Oetzmann이 제시한 값을 사용한다. 비탄성산란에 의한 에너지손실은 저에너지일 때의 Lindhard-Scharff의 저지능과, 고에너지 영역에서는 Bethe-Bloch[21]의 저지능식을 사용한다. 몬테칼로계산의 무작위 난수는 산란각에 대한 무작위 난수, 복합원자인 경우에 대한 충돌원자선택의 난수, 그리고 주행거리를 결정하는 평균 비거리에 대하여 Poisson분포로 주어지는 난수로 주어진다.

III. 결과 및 비교

프로그램의 응용성과 신뢰성을 보이기 위하여 대표적인 계산결과를 알려진 실험자료 및 다른 전산프로그램의 결과와 비교하였다. 프로그램의 검증차원에서 일반적인 자료비교는 평균투영거리(Mean Projected Range : R_p)에 대한 결과로서 비교한다. 이 논문에서는 이온과 시료로서 B⁺-Si, Sb⁺-Si에 대한 계산결과를 나타낸다. 또한 입사 이온은 시료에 수직으로 입사하는 경우로 한정하며 대개 입사이온의 수는 5000정도로 하였다.

III-1. 보론(B) -실리콘(Si)

B⁺-Si의 이온과 시료에 대한 전산결과에 대한 실험적인 조사는 일반적인 관련연구에서 흔히 사용된다. 이는 투영거리의 분포에 대한 여러 가지 측정치가 각각 다른 방법의 실험결과에서 보고되었기 때문이다. Brice와 Gibbons는 운동학 방법에 의한 투영거리와 거리 통계에 대한 이론적인 예시와 함께 수리화한 표를 보고하였다. 그들은 모두 Lindhard-Scharff[24]의 저지능공식에서 $k/k_L=1.59$ 로 수정하였다. 우리도 이값을 사용하여 그림 1에서 에너지가 30 ~ 200 keV영역에 대한 투영거리(R_p)와 표준편차(σ)를 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. 표준 편차는 z축에 대한 분산으로서 $\sigma = \sqrt{\sum_i (\bar{x} - x_i)^2 / N}$ 로 주어진다. 그림 1에서 Hofker,와 Ryssel의 실험결과 및 Brice의 이론결과와 TRIM의 전산결과를 나타내었다. MCIS의 결과는 '96년에 발표한 Old-MCIS와 현재의 New-MCIS의 결과를 각각 ■ 와 ●로 나타내어 가는 실선과 굵은 실선으로 연결하여 나타내었다. Brice의 이론결과는 파선으로 표시하고 TRIM의 결과는 ×로 표시하여 파선으로 나타내었다. 그림 1의 결과들에서 Old-MCIS보다 New-MCIS가 실험결과 및 다른 계산결과와 잘 맞는다는 것을 알 수 있다. 다만 New-MCIS에서 20 keV이하의 낮은 에너지 영역에서 차이가 보인다. 이에 대한 보완이 필요함을 알 수 있다. 그림 2에 100 keV의 보론 이온을 실리콘 시료에 입사했을 때의 투영거리 분포를 나타내었다. Hofker의 실험결과에 비하여 MCIS나 TRIM의 결과가 약간 왼쪽으로 치우쳐 있으나 전반적인 경향은 크게 벗어나지 않음을 알 수 있다.

III-2. 안티몬(Sb)-실리콘(Si)

Oetzmann은 보다 정밀한 입사거리의 측정을 입사이온의 저에너지 영역에까지 확장하여 측정하였다. 즉 Sb 이온의 에너지 5 keV ~ 100 keV 를 Si시료에 입사하였다. 그림 3에 이들의 결과를 Brice의 이론치와 TRIM 결과와 함께 나타내었다. 또한 우리의 결과인 Old-MCIS와 New-MCIS를 함께 나타내었다. TRIM의 결과는 실험치에 비하여 비거리에서 10~20%정도 낮게 나타났다. 또한 Old-MCIS는 TRIM보다 더 낮으나 New-MCIS는 실험치보다 5 ~ 10% 작으나 상당히 근접하고 있으나 낮은 에너지 (~ 5 keV)영역에서는 그 차이가 다소 크게 나타나는 결과를 얻었다.

IV. 결론

비정질 고체시료에 이온을 입사하였을 때의 시료에서의 이온산란의 몬테카를로 프로그램인 TRIM을 소개하였다. 이온의 산란에서 평균 자유행로 $\lambda = N^{-1/3}$ 으로 하여 산란단면적 $\sigma = N^{-2/3}$ 으로 하여 이온이 시료의 개별입자와의 충돌을 직접 반영하였다. 또한 MCIS는 사용자 편의를 위하여 Window 환경에서 구현하였다.

B⁺와 Sb⁺ 이온의 Si에 대한 계산결과를 기존에 발표된 실험결과 및 이론결과들과 비교한 결과 이온의 에너지 $\sim 20 \text{ keV} < E_0 < \sim 200 \text{ keV}$ 의 영역에서 잘 맞는다. 그러나 MCIS 프로그램에 새로운 모델식의 도입으로 저에너지 영역으로의 확장이 필요하다.

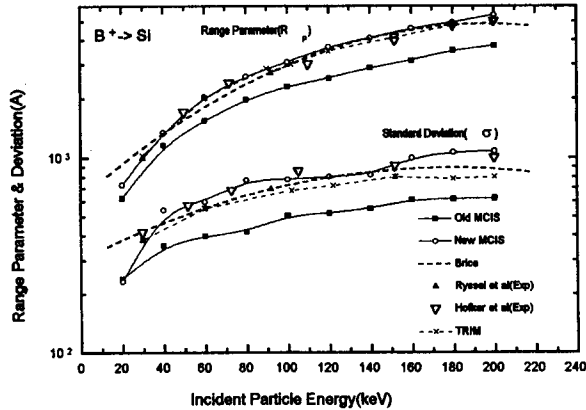


그림 1

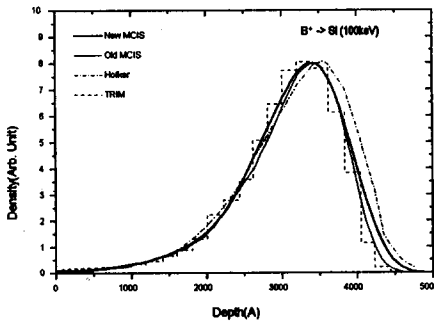


그림 2

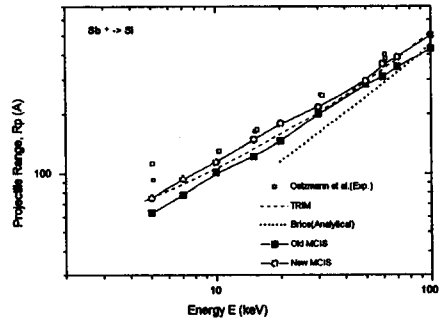


그림 3