

물질내의 이온수송에 대한 Monte Carlo 전산모사

조 광 섭

광운대학교 전자물리학과(기초과학 연구소)
(1996년 4월 16일 접수)

Monte Carlo simulation for the transport of ion in matter

Guang Sup Cho

Department of Electro-physics, Kwangwoon Univ.
447-1 Nowon Gu Wallgye Dong, Seoul, Korea
(Received April 16, 1996)

요 약 - 비정질 고체시료에 입사한 이온의 산란과 탄성충돌에 의한 시료원자의 산란을 몬테칼로 방법으로 전산모사 프로그램을 개발하였다. 핵산란은 Kalbitzer와 Oetzmann이 실험적인 검증을 통하여 보정한 만유산란 단면적식을 사용하고, 전자적인 에너지 손실은 Lindhard-Scharff와 Bethe의 공식들을 내삽법으로 적용하였다. 그외의 공식들은 최근에 이르기까지 대부분의 전산모사 프로그램에서 일반적으로 사용하는 방법을 적용하였다. 이온들의 산란형태 및 산란 비거리 등의 결과가 기존의 TRIM과 PIBER 프로그램 결과뿐만 아니라 이미 보고된 실험치와 잘 일치함을 보여 주었다. 또한 프로그램의 사용자 편의를 위하여 Graphic User Interface 방식을 사용하였다.

Abstract - The scattering of incident ions and target atoms in the amorphous solid matters are calculated by Monte Carlo simulation method. The experimentally derived universal scattering cross-section of Kalbitzer and Oetzmann is used to describe nuclear scattering. For electronic energy loss, the Lindhard-Scharff and Bethe formula are used. Comparing the ion scattering formulas and ranges with the known results of experiment and other programs, we find our results are good agreement with others.

1. 서 론

고체내에 입사하는 이온의 산란은 이온주입(ion-implantation), 복사충격(radiation damage), 스퍼터링(sputtering), 그리고 반사(reflection) 및 투과(transmission)와 관련하여 연구되어 왔다. 근래에는 이온빔 리소그래피의 응용에도 활발히 연구되고 있다. 또한 이온산란은 이차이온 질량분석(Secondary Ion Mass Spectrometry: SIMS[1-3])의 연구와 관련 된다. 즉 이온이 표적원자에 충돌하여 그 층을 하나씩 스퍼터링하는 과정으로 이해된다. 즉 입사이온의 핵충돌(nuclear collision)은 내부원자의 운동과 변위등을 동반하여 혼란(cascade)스럽게 만든다. 그 결과로 표적층 원자의 혼합(atomic mixing[4-5])이나 원자조성비의 변화를 가져온다. 따라서 이차이

온 미세분석(secondary ion microanalysis)과 두께분석(depth analysis) 및 층분석 등이 이온빔 스퍼터링[6-7]과 함께 연구된다. 최근에는 이온빔 집속장치(Focused Ion Beam: FIB)를 이용한 미세구조의 형성기술과 관련된 이온빔 리소그래피[8-15]가 전자빔 리소그래피의 단점인 근접효과(proximity effects)의 문제가 거의 없는 것으로 보고되어 각광받고 있다.

고체내에서의 이온 충돌에 대한 연구는 1950년 중반부터[16] 활발히 연구되었다. 그후 Lindhard와 그의 동료들에 의하여 1963-1968년 사이에 발표된 「Notes on Atomic Collision」[17]에서 이온산란에 대한 이론이 정립되었다. 그들은 원자의 저지능(stopping power)이론을 포괄적으로 종합화 했고, 핵충돌(nuclear collision)과 전자충돌(electron collision)을 각각 독립적으로 다루었다.

즉 이온이 에너지 손실에 따라서 점점 느려지는 과정을 두가지 상호독립된 핵 저지능과 전자 저지능으로 기술한다. 그런데 핵에 의한 저지능은 주로 낮은 에너지영역의 이온산란에 해당되며, 전자에 의한 저지능은 높은 에너지영역의 이온산란에 주요 역할을 하는 것으로 알려져 있다. 또한 탄성충돌은 핵에 의한 저지능으로서 핵과의 산란시에 에너지를 잃는 것으로 불연속적(discrete)인 에너지 손실 특징을 갖는다. 전자에 의한 저지능은 비탄성충돌로 취급하여 전자와의 복합산란에 의한 연속적인 에너지 손실(continuous energy loss)로 기술된다. 예를 들면 1~0.1 MeV의 에너지를 갖는 이온의 산란은, 가벼운 이온의 경우 산란초기에는 주로 비탄성 산란이 되며, 산란후기에 에너지가 작아지면 주로 탄성산란에 의하여 에너지 손실이 일어난다. 반면에 무거운 이온은 처음부터 탄성산란이 주로 일어난다. 이때에는 일반적으로 전자적인 저지능의 기여도는 총저지능력의 약 10%에 해당한다[18].

저지능(stopping power)과 비거리(range)에 대한 연구는 1960년 초부터 시작되어 Firsov[19]와 Lindhard *et al.* [17]이 이에 대한 해를 소개하였다. 이들은 주로 위치에너지(potential)로서 Thomas-Fermi potential을 사용하였다. 그런데 비거리에 대한 그들의 이론치는 그후의 실험치와 다소 상이하였다. 즉 높은 에너지 영역에서는 비교적 잘 일치하지만, 낮은 에너지 영역에서는 상당한 차이를 나타내었다. 이러한 초기의 실험결과[20-22]는 그후에도 확인되었는데 Keinonen *et al.* [23]은 낮은 에너지 영역에서 저지능과 비거리의 값들이 상당한 차이가 있음을 보고하였다. 또한 Kalbitzer *et al.* [24]은 에너지 값이 극히 작은 값에서는 심지어 이론치와 100%이상의 차이가 있음을 보여주고 있다. 결국 이러한 차이는 이론적인 가정과 이론의 전개 과정에 심각한 재고가 요구되었다. 그리하여 Lindhard *et al.* [17-b]은 위치에너지의 Thomas-Fermi 모델이 저에너지영역에서는 부정확함을 알게되었다. 즉 Thomas-Fermi potential에 의한 근사된 산란 단면적은 낮은 에너지의 영역에서는 비거리가 두드러지게 작게 나타남을 보였다. 그 이유는 에너지가 낮은 경우는 원자 바깥에 있는 전자의 밀도가 과다하게 고려되었기 때문에 비거리가 작게 나타난다는 것으로 설명되고 있다. 그리하여 보다 실제적인 상호 위치에너지 함수가 제시되었으며, Moliere[25]와 Lenz-Jensen [26]의 이론식들이 실제와 근접하는 결과를 보여주었다. 그외에도 여러 사람들의 이론[27]이 낮은 에너지에 대

한 실험결과[18, 28]와 상당히 근접하고 있다. 이러한 결과는 Wilson *et al.* [27]와 Kalbitzer *et al.*[18]도 이 사실을 잘 반영하고 있다.

이온산란을 연구하기 위한 Monte Carlo 방법은 일찌기 Berger[29]가 자세하게 소개하였다. 이 방법을 이용하여 Robinson, Oen과 Holmes[30-32], 그리고 Beeler과 Besco[33] 등은 이온의 핵산란(nuclear scattering)에 잘 적용하였다. 그러나 이들도 전자의 저지능(electronic stopping)을 고려하지 않았기 때문에 무거운 이온빔(Heavy ion beam)에만 적용될 수 있다. 그후 전자의 저지능을 T. Ishitani *et al.* [34-35]이 MC-모사에 가벼운 이온빔(light ion beam)에도 적용할 수 있게 되었다. 또한 Betz *et al.* [36]은 높은 에너지 영역에서는 Thomas-Fermi potential을 사용하고, 낮은 에너지 영역에서는 Born-Mayer potential을 사용하였다. Ishitani와 Shimizu[15]는 Lenz-Jensen potential을 사용했고, Kang *et al.* [37]도 Thomas-Fermi potential과 modified Born-Mayer potential[38]을 사용하였다. 그외에도 MC-방법에 의한 이온산란의 연구가 많이 보고되었다[39-45]. 이들 대부분은 주로 표적시료가 정질(crystalline)과 비정질(amorphous), 혹은 탄성(elastic)산란 즉 핵산란을 어떻게 처리하느냐가 주된 차이점이다. 일반적으로 에너지손실의 형태는 핵충돌에서는 불연속적인 에너지손실이 특징이고, 전자적인 상호작용에 의한 비탄성 충돌은 연속적 에너지손실로 다루고 있는 것이 특징이다. 특히 낮은 에너지에서는 핵산란에 의한 에너지손실이 특히 중요하다. 핵산란의 경우는 대개 Moliere[25]가 제안한 원자간의 위치에너지와 유사한 모형들을 사용하여 왔다. 그러나 고에너지에서는 비차폐 쿨롱전위(Unscreened Coulomb Potential)로도 충분하다. 전자적인 에너지손실의 경우, 낮은 에너지에서는 입사속도와 관계되는 Lindhard와 Scharff[46]의 모형을 주로 사용한다. 고에너지에서는 Bethe-Bloch 모형을 사용한다. 이들 사이의 중간에너지 영역에서는 Biersack [47, 49]의 내삽법(Interpolation Scheme)을 사용하고 있다.

그동안 알려진 주요 Monte Carlo 프로그램은 다음과 같다. Robinson *et al.* [31]이 발표한 MAELOWE -Code에서는 Moliere potential을 사용하여 고전적인 산란에 관한 적분을 수치적으로 계산하여 산란각을 결정하였다. 처음에는 단일 결정구조에서 이계충돌(binary collision)근사법을 사용하였다. 그후 프로그램들이 결정구조의 축을 회전하여 비정질시료에도 적용할 수 있도록

확장[41,50]하였다. 또한 Biersack *et al.* [49]이 만든 TRIM-Code(Transport of Ions in Matter)는 저에너지 영역에서는 단일산란모델(single scattering model)을 사용하고 고에너지 영역에서는 복합산란모델(multiple scattering model)을 사용하였다. Ishitani *et al.* [4, 5, 34]는 에너지와 관련된 주행거리를 사용하여 단일산란모델을 소개하였고 그후 연속적인 전자적 에너지 손실을 개개의 진행과정에 적용[55]하였다. Adesida *et al.* [12, 13]은 PIBER(Program for Ion Beam Exposure of Resist)를 소개하였다. 여기서는 LSS-형에 기초한 상호위치에너지와 관련하여 Winterbon *et al.* [56]의 제안식에서 상수들을 Kalbitzer *et al.* [18]의 실험치와 맞추어서 결정하였다. 그후 위에서 소개하는 프로그램들이 원자간의 potential과 전자에 의한 저지능에 대하여 보다 실험치에 의한 계수조정을 통하여 실증적인 모델을 사용하여 최근에 이르기까지 거듭 개선[51-54] 되었다. 그외에도 많은 저자들이 독자적으로 프로그램을 만들어서 관련연구를 하고 있다.

2. Monte Carlo 방법의 산란모델과 계산 과정

MC-프로그램에서의 주요한 점은 탄성산란, 즉 핵산란을 어떻게 취급하느냐는 것이다. 여기에서 사용하는 물리적인 가정을 토대로 하여 계산과정을 상술한다.

이온산란의 주요 가정은 다음과 같다;

- i) 시료의 원자배열은 임의적인 것으로 비정질시료로 취급한다.
- ii) 입사이온과 표적원자간의 개별적인 두 입자간의 충돌로 하고 주위 원자들의 영향은 고려하지 않는다.
- iii) 핵적인 충돌에 의한 에너지 손실과 전자적인 에너지 손실(저지능)은 LSS[17]이론에 따라서 독립적으로 다룬다.
- iv) 핵산란을 위하여 LSS-형에 기초한 원자간 위치 에너지를 사용한다.
- v) 저에너지 영역에서 전자저지능은 속도와 관계가 있는 Lindhard와 Scharff식을 사용하고, 고에너지 영역에서는 Bethe-Bloch식[57, 58]으로 계산한다.
- vi) 다중원자의 표적에 대하여 각원소에 대한 전자저지능은 그들의 원자수의 밀도에 비례하여 Bragg 법칙을 적용한다.

위와 같이 핵산란과 그에 따른 에너지 손실 그리고 전자저지능을 적용한다.

2.1 핵산란에 대한 산란각과 에너지 손실

LSS이론에서 핵산란 미분단면적은 Thomas - Fermi의 원자간의 상호 위치에너지를 배경으로

$$d\sigma = \pi a^2 \frac{dt}{2t^{1/2}} f(t^{1/2}) \quad (1)$$

로 주어진다. 여기서 t 는 질량중심의 산란각을 나타내는 데,

$$t^{1/2} = \varepsilon \sin \frac{\theta}{2} \quad (2)$$

이다. 여기서 ε 은 무차원의 축소에너지(reduced energy)로서

$$\varepsilon = E \frac{a}{Z_1 Z_2 e^2} \frac{M_2}{M_1 + M_2} \quad (3)$$

로 주어지고, 이때 Z_1, Z_2 는 입사 및 표적 입자의 원자번호이고, M_1 과 M_2 는 각각의 질량이다. 또한 a 는 차폐변수(screening parameter)로서 Thomas-Fermi반경인

$$a = 0.8853 a_B (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2} \quad (4)$$

이며, a_B 는 Bohr 반경으로서 $a_B=0.529$ 이다.

만유산란함수(universal scattering function)인 차폐함수 $f(t/2)$ 는

$$f(t^{1/2}) = \lambda t^{1/2-m} [1 + (2\lambda t^{1-m})^q]^{-1/q} \quad (5)$$

로서 Winterbon *et al.* [56]이 유도한 근사식이다. 여기에서 계수 λ, m , 그리고 q 는 그동안 많은 저자들이 서로 다른 값을 사용하였는데 가장 최근에 실험적인 검증을 토대로 Kalbitzer와 Oetzmann[28]이 제시한 2.54, 0.25, 그리고 0.475를 사용한다.

위의 식(1)로부터 탄성산란각은 난수 R_q 와의 관계

$$R_\theta = \frac{\int_{t_{\min}}^t d\sigma}{\int_{t_{\min}}^t d\sigma} \quad (6)$$

에 의해 결정된다. t_{\max} 은 $\theta=\pi$ 일때의 값이며, t_{\min} 은 $\sin(\phi_{\min}) \approx 0.01$ 인 θ 값에 해당한다. 또한 방위각 π 는 구대칭을 가정하여 난수 R_q 와 함께

$$\phi = 2\pi R_\phi \quad (7)$$

로 결정된다. 복합원자로 구성된 시료에서 입사이온이 어느 원자와 충돌하는가의 결정은 i -원자와의 충돌확률

$$P_i = \frac{N_i \sigma_i}{\sum_i N_i \sigma_i} = \frac{dC_i N_A \sigma_i}{A_i} \bigg/ \sum \frac{dC_i N_A \sigma_i}{A_i} \quad (8)$$

로부터 결정한다. 여기서 C_i 는 i 원자의 무게비율, d 는 밀도, A_i 는 원자량, 그리고 N_A 는 아보가드로 상수이다.

핵산란에 의한 에너지손실에 해당하는 핵저지능은 탄성산란과정에서 에너지와 운동량 보존관계에서

$$\epsilon_2 = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \epsilon \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (9)$$

로 주어진다. 따라서 산란후 입사 이온의 에너지는 $\epsilon_1 = \epsilon - \epsilon_2$ 가 되며, 실험좌표계에서의 산란각 q 1은

$$\sin(\theta_1) = \frac{M_2 \sin \theta}{\sqrt{M_1^2 + M_2^2 + 2M_1 M_2 \cos \theta}} \quad (10)$$

로 계산된다. 표적 원자핵이 갖는 에너지는 ϵ_2 이고, 산란각 θ_2 는

$$\theta_2 = \frac{1}{2}(\pi - \theta) \quad (11)$$

로 산란한다. 방위각도 각각 $\phi_1 = 2\pi R_\phi$ 와 $\phi_2 = \phi_1 + \pi$ 로 주어진다. 그리하여 입사이온의 산란과 표적 원자이온의 산란을 동시에 다루게 된다.

산란각과 충돌에 의한 에너지 손실이 결정되면 복합원소를 고려한 평균 비거리는

$$\Lambda = \left(\sum_i n_i \sigma_i\right)^{-1} \quad (12)$$

로 주어지고, 주행거리는 Poisson분포를 가정하여 난수 R_s 와의 관계인

$$S = -\Lambda \ln(1 - R_s) \quad (13)$$

로 주어진다.

2.2 전자산란에 의한 에너지 손실

전자에 의한 저지능은 입사이온의 속도에 따라서 Lindhard-Scharff의 저지능[17]과 Bethe의 저지능으로 구분된다. 이들은 각각 저에너지와 고에너지 영역에 적

용된다. 낮은 에너지영역인 $v < v_B Z^{2/3}$ (v_B 는 Bohr의 첫째 전자의 속도)에서는 비거리 S 무차원변수로서

$$\rho = SNM_2 \cdot \pi a^2 \cdot \frac{4m}{(M_1 + M_2)^2} \quad (14)$$

를 사용하여

$$-\left(\frac{d\epsilon}{d\rho}\right)_L = C_k k \epsilon^{1/2} \quad (15)$$

로 표현된다. 이때 상수 k 는

$$k = Z_1^{1/6} \frac{0.0793Z_1^{1/2} Z_2^{1/2} (A_1 + A_2)^{3/2}}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}) \cdot A_1^{2/3} A_2^{1/2}} \quad (16)$$

이며, C_k 는 변수 k 의 수정상수인데 비탄성 저지능에서 Z_2 원자의 진동을 고려한 값이다. 이 상수는 0.67~2.4로서 많은 사람들이 실험치와 맞추어 사용하고 있다.

높은 에너지 영역인 $v > v_B Z^{2/3}$ 에서는

$$-\left(\frac{d\epsilon}{d\rho}\right)_H = \frac{8\pi Z_1^2 e s^4}{I_0 \epsilon_B} N \cdot \ln(\epsilon_B + 1 + C/\epsilon_B) \quad (17)$$

를 사용한다. 여기서

$$\epsilon_B = \frac{2m_2 v^2}{Z_2 I_0} \quad (18)$$

이고, m_2 는 전자의 질량이며 $Z_2 I_0$ 는 평균이온화 포텐셜이다.

I_0 는 Z_2 에 따라서

$$I_0 = \begin{cases} 12 + 7Z_2^{-1} & : Z_2 < 13 \\ 9.76 + 58.5Z_2^{-1.19} & : Z_2 \geq 13 \end{cases} \quad (19)$$

로 주어지고, 식(17)에서 상수 C 는 $5(Z_1 \geq 3)$ 혹은 $100Z_1/Z_2(Z_1 < 3)$ 를 사용한다. 또한 저에너지와 고에너지의 중간 영역은 Andersen과 Ziegler[59] 등이 제시한 내삽법을 사용하여

$$\left(\frac{d\epsilon}{d\rho}\right)_M = \left[\left(\frac{d\epsilon}{d\rho}\right)_H^{-1} + \left(\frac{d\epsilon}{d\rho}\right)_L^{-1}\right]^{-1} \quad (20)$$

를 사용한다. 경계속도 $v = Z_1^{2/3} v_B$ 의 값은 양성자의 경우는 대개 25keV에 해당하고 중수소(deuteron)는 50keV의 값에 해당하며, 대개 $v > Z_1^{2/3} v_B$ 일때는 이와같은 내

사범에 의한 식을 쓰고 그 이하의 속도 영역에서는 $(d\epsilon/d\rho)_L$ 을 사용한다.

2.3 이온산란의 계통도

입사이온이 표적이온과 탄성충돌하여 표적이온은 입사이온으로 부터 받은 에너지 (식(9))에 의하여 시료내 부에서 산란을 한다. 즉 매번 충돌할 때마다 피충돌입자가 발생하며 이들 피충돌입자의 산란을 동시에 고려해야한다. 그리하여 입사입자와 피충돌입자의 에너지가 모두 소진될때까지 산란계산을 계속하게 된다.

입사입자와 피충돌입자들의 산란 계통도를 그림(1)에 나타내었다. 입사입자가 충돌하여 생긴 피충돌입자의 위치를 $X(it)$ 과 함께 에너지및 산란각 등도 같은 방식으로 기억한다. 이때 it 는 충돌하여 만들어진 피충돌 입자의 수를 나타낸다. 입사입자의 산란에 의해 생성된 표적입자의 산란정보를 기억해 두고 입사입자의 에너지가 소멸한후 표적입자의 산란을 역순으로 계산한다.

즉 최후의 표적입자가 $it=it_f$ 이라면 위치 $X(it_f)$ 에 생긴 피충돌입자의 산란을 계산하고 이 입자의 산란이 끝나면 위치 $X(it_f-1)$ 에 생긴 입자의 산란을 계산하며, 이 입자의 에너지가 소멸하면 $X(it_f-2)$ 위치의 입자 산란을 계산하여 위치 $X(1)$ 까지의 입자의 산란을 역순으로 계산한다. 임의의 위치 $X(it)$ 의 입자가 첫번째 충돌하여 만들어진 또 다른 피충돌 입자의 위치를 $X(it)$ 의 값으로 다시 저장하고 이후 연쇄적인 충돌에 의하여 발생하는 입자는 $X(it+1), X(it+2), \dots, X(it_f)$ 의 위치로 기억되어 각 입자의 에너지가 소멸되면 산란을 멈추고 최후 $X(it_f)$ 의 입자 부터 다시 역순으로 거슬러서 계산을 한다.

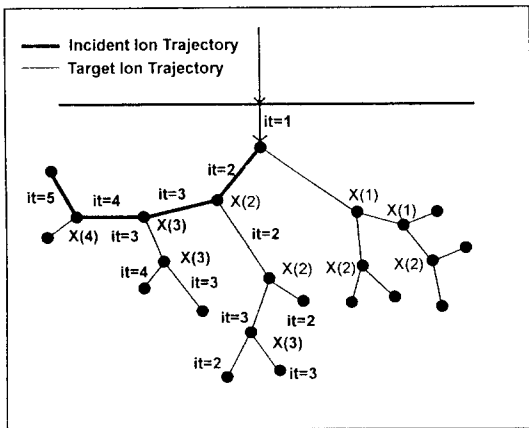


그림 1. Trajectory Hierarchy.

3. 결과 및 논의

3.1 이온산란계적

Monte Carlo 방식의 전산모사에 의하면 시료에서 이온의 산란형태를 쉽게 나타낼 수 있다는 장점이 있다. 몇가지 이온과 시료에 대한 전형적인 산란계적의 결과를 그림(2)-(5)에 나타내었다. 일반적으로 가벼운 원자와 무거운 원자들의 시료에 따른 산란형태가 각각 큰 차이를 보여 준다. 그림(2)는 10 keV의 H^+ 이온 100개를 Au 시료에 조사한 결과이다. 평균투과 비거리는 약 0.06 μm 정도이며 횡방향의 퍼짐도는 약 0.03 μm 이다. 산란초기 10 keV의 에너지일때는 수백 Å의 비거리를 주행하여 에너지를 잃어 수 keV의 에너지가 되어 수십 Å의 주행을 하며 대개 수십회의 탄성충돌을 한다. 수소이온은 가벼운 원소이고 에너지가 작기 때문에 탄성충돌에 의한 시료원

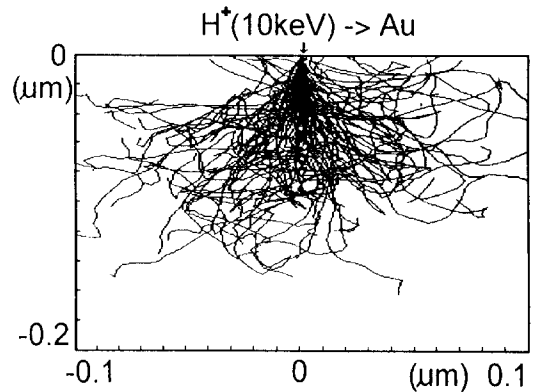


그림 2. 10 keV의 H^+ 이온을 Au시료에 100개의 이온을 조사한 계적.

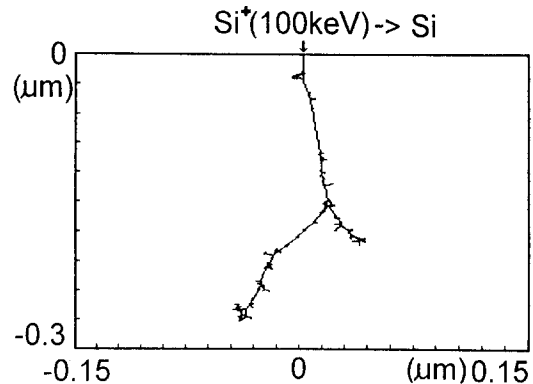


그림 3. 한 개의 100 keV인 Si^+ 이온을 Si시료에 조사한 계적.

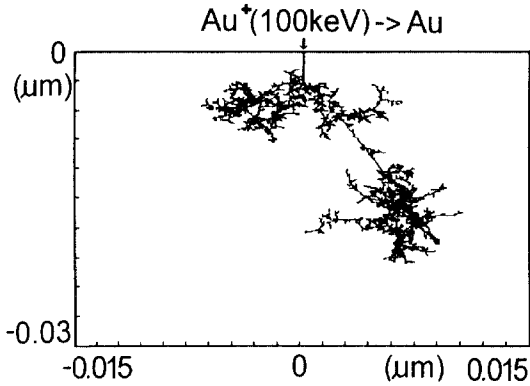


그림 4. 한 개의 100 keV의 Au⁺ 이온을 Au 시료에 입사하여 만들어지는 Au 입자들의 산란계통도.

자인 Au이온의 산란의 빈도가 극히 작음을 보여준다.

그림(3)과 같이 100 keV의 Si⁺이온을 Si 시료에 입사했을 때의 산란계통적이다. 입사 Si⁺이온은 0.3 μm 깊이로 투과되는 동안 수십회의 충돌에 의하여 시료원자의 Si 원자들의 산란이 수반되는 형태를 보여준다. 탄성충돌에 의해 수 10 keV의 에너지를 갖는 시료의 Si 원자는 수 100 Å의 주행거리를 갖는 경우도 있다. 대개는 수 Å의 주행을 한다.

무거운 원자인 100 keV의 Au⁺를 Au 시료에 입사한 그림(4)는 그림(3)과 같이 동일한 원자간의 충돌이지만 한 개의 Au⁺에 대하여 탄성충돌에 의하여 수십개의 Au 시료 원자가 발생하고 그들의 산란에 의한 더욱 복잡한 계통도를 보여준다. 즉 입사 이온에 의해 피충돌 Au 원자는 또 다른 피충돌 Au 원자들의 산란을 수반한다. 이는 무거운 원자의 산란이 가벼운 원자인 H⁺나 Si⁺이온보다 탄성충돌이 빈번하여 더욱 복잡한 산란구조를 갖는다.

그림(5)는 60 keV H⁺이온 100개를 PMMA 혹은 PMMA/ 시료위에 조사한 궤적이다. 각각 (a) Au 시료, (b) Si 시료, (c) PMMA에 100개의 수소이온을 입사하였다. 이 경우는 이온산란의 Monte Carlo 계산에 의하여 이온빔 리소 그래피에 응용할 수 있는 실제의 예이다. PMMA와 Au의 경계면에서의 산란형태가 전자빔 리소그래피에서 문제가 되는 배후산란이 심하지 않기 때문에 이온빔 리소 그래피가 근접효과(proximity)의 측면에서 유리함을 나타내고 있다.

3.2 비거리(Range)

이온산란 전산모사의 일반적인 검증은 위하여는 투과

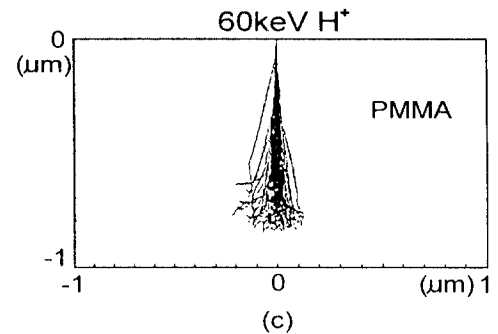
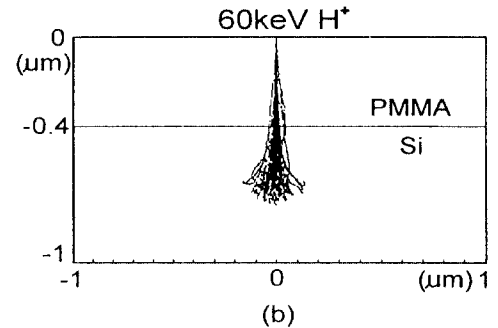
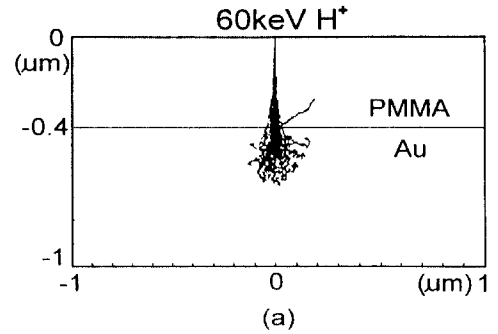


그림 5. 60 keV의 H⁺이온 100개를 PMMA 시료위에 조사한 궤적.

된 비거리를 실험치와 비교한다. 따라서 본 프로그램의 검증을 위하여 기존의 알려져 있는 프로그램의 전산모사 결과와 이미 보고된 바 있는 실험데이터에 의한 비거리를 비교하여 Table I과 Table II에 나타내었다.

저에너지 이온의 시료에서의 산란 비거리를 조사하므로써 전자적인 저지능과 원자핵산란의 적용공식을 검증하게 된다. 따라서 가벼운 원자인 수소이온이나 헬륨이온을 무거운 원자인 Au 시료에 입사한 경우를 Table I에 나타내었다. RP는 평균 투과깊이, R은 평균주행거리, 그리고 RN은 배후산란계수이다. 여기서는 PIBER, MARLOWE, 그리고 TRIM의 결과[12]를 우리의 결과와

Table 1. Comparison of Monte Carlo results an ranges and reflection coefficients for hydrogen and helium normally incident on gold. C_k is the correction coefficient of k and R_N is the fraction of primary ions that are reflected from the target

| E(keV) | Ion | C_k | Mean range $R_p(\text{\AA})$ | Mean Pathlength $R(\text{\AA})$ | R_N | Program |
|--------|-----|-------|---------------------------------|------------------------------------|-------|----------------|
| 8 | H | 1.4 | 491 | 1749 | 0.225 | PIBER |
| 8 | H | 1.4 | 475 | 1796 | 0.199 | TRIM |
| 8 | H | 1.4 | 515 | 1815 | 0.220 | MARLOWE |
| 8 | H | 1.4 | 500 | 1800 | 0.221 | Present result |
| 5 | He | 1.4 | 235 | 1030 | 0.361 | PIBER |
| 5 | He | 1.4 | 220 | 1032 | 0.335 | TRIM |
| 5 | He | 1.4 | 225 | 1032 | 0.359 | Present result |
| 10 | He | 1.0 | 440 | 2012 | 0.327 | PIBER |
| 10 | He | 1.0 | 431 | 1997 | 0.331 | TRIM |
| 10 | He | 1.0 | 436 | 2005 | 0.330 | Present result |

Table 2. Range Parameters of H in PMMA. The theoretical data are calculated using PIBER and present program with $C_k = 0.87$

| Energy | $R_p(\text{theory})$ | $R(\text{theory})$ | Developed depth(Experiment) |
|---------|----------------------|---------------------|-----------------------------|
| 60 keV | 0.782 μm | 0.858 μm | PIBER Present result |
| | 0.790 μm | 0.865 μm | |
| 150 keV | 1.800 μm | 1.870 μm | PIBER Present result |
| | 1.820 μm | 1.880 μm | |

비교하여 나타내었다. 이들 결과들이 상호간에 상당히 근사한 값을 보여주고 있다.

PMMA는 전자나 이온의 조사에 대하여 감광도가 좋은 폴리머로서 리소그래피에 널리 응용되고 있다. 따라서 최근에 이온빔 리소그래피연구에서 높은 에너지를 갖는 이온의 시료에서의 산란이 큰 관심을 보여주고 있다. 특히 폴리머에서의 이온의 비거리에 대한 실험결과는 그리 많이 알려져 있지 않다. Table II에서는 이온빔 리소그래피와 관련하여 수소이온의 PMMA에서의 비거리를 나타내었다. 우리의 결과를 PIBER 및 실험적으로 알려진 결과[12]와 비교하였다.

4. 결 론

이온의 고체에서의 산란을 연구하기 위한 Monte Carlo 전산모사 프로그램을 개발하였다. 핵산란에서 Kalbizer와 Oetzmann[18]의 실험치에 의한 보정 상수를 사용한 만유핵산란 단면적을 적용하였고 전자저지능은 Lindhard-Scharff[17]와 Bethe[57]의 공식을 내삽법을 적용하여 사용하였다. 기타 최근에 대부분의 전산프로그램에서 일반적으로 사용하는 것으로서 Adesida *et al.*

[12]에서 잘 소개되어 있는 것들을 적용하였다. 이온산란의 특징으로서 가벼운 이온과 무거운 이온들이 시료의 종류에 따라서 그 산란형태에 있어서 각각 다른 특성을 갖는다. 가벼운 이온은 시료의 원자산란이 거의 나타나지 않지만, 무거운 이온은 시료와의 핵산란에 의한 피층돌 원자의 산란이 두드러지게 나타났다. 이는 가벼운 이온의 산란은 주로 비탄성 산란에 의한 것이며 무거운 이온의 산란은 주로 탄성산란에 기인된 것임을 입증하고 있다. 또한 이온빔 리소그래피의 연구와 관련하여 PMMA/시료에서의 산란이 전자빔 리소그래피의 배후 산란에 의한 근접효과의 문제가 이온빔 리소그래피에서는 상대적으로 심각하지 않음을 보여준다. 또한 산란에 의한 비거리의 계산 결과가 기존에 알려진 TRIM, MARLOWE, 그리고 PIBER 등의 Monte Carlo 프로그램의 결과 및 이미 보고된 바 있는 실험치와 잘 일치함을 보여 준다.

이 프로그램은 이온빔 리소그래피와 관련된 전산모사 및 이온주입과 이온빔의 스퍼터링 등의 전산연구에 유용하게 사용될 수 있을 것이다. 또한 Graphic User Interface 방식을 사용하여 사용자가 편리하게 사용할 수 있도록 프로그램을 개발하였다.

감사의 글

1. 이 연구는 MIT의 Research Laboratory of Electronics의 Dr. John Melngailis의 연구팀에서 그들의 협조에 의해 수행되었으며 이에 감사드립니다.
2. 이 연구는 한국과학재단의 핵심전문연구과제(KOSEF 941-0200-042-1)로 수행되었습니다.

참고문헌

1. C. A. Evans, Jr. *Anal. Chem.* **44**, 67A (1972).
2. A. Benninghoven, *Surface Sci.* **35**, 427 (1973).
3. H. W. Werner, H. A. M. De Grefte, *Surface Sci.* **35**, 458(1973).
4. T. Ishitani, R. Shimizu, *Phys. Letters*, **46A**, 487 (1974).
5. T. Ishitani, R. Shimizu, *Appl. Phys.* **6**, 241 (1975).
6. G. K. Wehner, *Method of Surface Analysis*, ed. A. W. Czanderna (Elsevier, New York, 1975) Chap. 1.
7. S. T. Kang, R. Shimizu, T. Okutani, *Japn. J. Appl. Phys.* Vol. 18, No. 9, 1717 (1979).
8. R. L. Seliger, W. P. Fleming, *J. Appl. Phys.* **45**, 1416 (1974).
9. L. Karapiperis, C. A. Lee, *Appl. Phys. Lett.* **35**, 395 (1979).
10. M. Komuro, N. Atoda, H. Kawakatsu, *J. Electrochem. Soc.* **126**, 483 (1979).
11. L. Karapiperis, I. Adesida, C. A. Lee, E. D. Wolff, *J. Vac. Sci. Technol.* **19**(4), 1259 (1981).
12. I. Adesida, L. Karapiperis, *Radia. Effects*, **61**, 223 (1982).
13. I. Adesida, L. Karapiperis, *J. Appl. Phys.* **56**, 1801 (1984).
14. R. L. Kubena, J. Y. M. Lee, R. A. Jullens, R. G. Brault, P. L. Middleton, E. H. Stevens, *IEEE Trans. Electron. Devices.* **ED-31**, 1186 (1984).
15. T. Kato, H. Morimoto, H. Onoda, *Nucl. Instruments and Meth. in Phys. Research* **B30**, 44 (1988).
16. G. Carter, J. S. Colligon, *Ion Bombardment of Solid* (Heineman Educational Books Ltd., London, 1968).
17. 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. Linhard, V. Nielson, M. Scharff, *Mat. Fys. Medd.*, **36**, 10 (1968).
18. S. Kalbitzer, H. Oetzmann, *Radia. Zff.*, **47**, 57 (1980).
19. O. B. Firsov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **32**, 1464 (1954); **33**, 696 (1957); **34**, 447 (1958); *Sov. Phys. -JETP* **5**, 1192 (1957); **7**, 308 (1958); **9**, 1076 (1959).
20. J. A. Davies, G. A. Sims, *Can. J. Chem.* **39**, 601 (1961); P. Jespersgaard, J. A. Davies, *Can. J. Phys.* **45**, 2983 (1967).
21. H. Luts, R. Sizmann, *Phys. Lett.* **5**, 113 (1963); J. L. Whitton, *Can. J. Phys.* **46**, 581 (1968).
22. V. A. J. van Lint, M. E. Wyatt, R. A. Schmitt, C. S. Suffredini, D. K. Nichols, *Phys. Rev.* **147**, 242 (1966); V. A. T. van Lint, R. A. Schmitt, C. S. Suffredini, *Phys. Rev.* **121**, 1457 (1961); R. A. Schmitt, R. A. Sharp, *Phys. Rev. Lett.* **1**, 445 (1958).
23. M. Bister, A. Antilla, J. Keinonen, *Phys. Lett.* **A53**, 471 (1975).
24. A. Feuerstein, S. Kalbitzer, H. Oetzmann, *Phys. Lett.* **A51**, 165 (1975); H. Oetzmann, A. Feuerstein, A. Grahmann, S. Kalbitzer, *ibid.* **55**, 170 (1975).
25. G. Molire, *Z. Naturt.*, **2a**, 133 (1947).
26. W. Lenz, *Z. Physik*, **77**, 713 (1932); H. Jensen, *Z. Physik*, **77**, 722 (1932).
27. W. D. Wilson, L. G. Haggmark, J. P. Biersack, *Phys. Rev.* **B15**, 2458 (1977).
28. H. Oetzmann, A. Feuerstein, H. Grahmann, S. Kalbitzer, *Phys. Lett.* **55A**, 170 (1975); A. Feuerstein, S. Kalbitzer, H. Oetzmann, *Phys. Lett.* **51A**, 165 (1975).
29. M. J. Berger, *Methods in Computational Phys.* ed. B. Alder, S. Fernbach and H. Rotenberg (Academic Press, New York and London, 1963) P. 135.
30. O. S. Oen, D. K. Holmens, M. T. Robinson, *J. Appl. Phys.* **34**, 302 (1963).
31. M. T. Robinson, O. S. Oen, *Appl. Phys. Letters*, **2**, 30 (1963); *Phys. Rev.* **132**, 2385 (1963).
32. O. S. Oen, M. T. Robinson, *J. Appl. Phys.* **35**, 2515 (1964).
33. J. R. Beeler, D. G. Besco, *J. Appl. Phys.* **34**, 2874 (1963); *Phys. Rev.* **A134**, 530 (1964).
34. T. Ishitani, K. Murata, R. Shimizu, *Japan. J. Appl. Phys.* **10**, 1464 (1971).
35. T. Ishitani, R. Shimizu, K. Murata, *Japan. J. Appl. Phys.* **11**(2), 125 (1972).
36. G. Betz, R. Dobrozemsky, F. P. Viehbock, *Int. J. Mass Spectrum. & Ion Phys.* **6**, 451 (1971).
37. S. T. Kang, R. Shimizu, T. Okutani, *Japan. J. Appl. Phys.* **18**(9), 1717 (1979).
38. P. Sigmund, *Phys. Rev.* **184**, 383 (1969).
39. M. Yoshida, *J. Phys. Soc. Japan* **16**, 44 (1961).
40. O. S. Oen, M. T. Robinson, *J. Appl. Phys.* **35**, 2515 (1964).
41. M. T. Robinson, I. M. Torrents, *Phys. Rev.* **B9**, 5008

- (1974).
42. J. E. Robinson, Rad. Eff. **23**, 29 (1974).
 43. K. Guttner, Z. Naturforsch. **26a**, 1290 (1971). K. Guttner, H. Ewald, H. Schmidt, Rad. Eff. **13**, 111 (1972).
 44. D. K. Hutchence, S. Hontzeas, Nucl. Instr. and Meth. **116**, 217 (1974).
 45. D. A. Eastham, Nucl. Instr. and Meth. **125**, 277 (1975).
 46. J. Lindhard, M. Scharff, Phys. Rev. **124**, 128 (1961).
 47. J. P. Biersack, D. Fink, Ion Implantation in Semiconductors(ed. S. Namba; Plenum Press, N. Y., 1974) P. 211.
 48. J. P. Biersack, D. Fink, Atomic Collision in Solid, Vol. 2 (Plenum Press N. Y., 1975) P. 737.
 49. J. P. Biersack, L. G. Haggmark, Nucl. Instr. and Meth. **174**, 257 (1980).
 50. M. T. Robinson, Phys. Review **B27**, 5347 (1983).
 51. J. P. Biersack, W. G. Eckstein, Appl. Phys. **A37**, 73 (1984).
 52. J. P. Biersack, Fus, Technol. **6**, 475 (1984). W. Eckstein, J. P. Biersack, Appl. Phys. **A38**, 123 (1985).
 53. W. Eckstein, J. P. Biersack, Appl. Phys. **A38**, 123 (1985).
 54. J. P. Biersack, Nucl. Instr. and Meth. **B27**, 21 (1987).
 55. T. Ishitani, R. Shimzu, Jpn. J. Appl. Phys. **22(2)**, 329 (1983).
 56. K. B. Winterbon, P. Sigmund, J. B. Sanders, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **37(14)**, (1970).
 57. H. A. Bethe, Ann. Phys. (Leipz.) **5**, 325 (1930).
 58. F. Bloch, Z. Phys. **81**, 363 (1933).
 59. H. Andersen and J. Ziegler, Hydrogen Stopping Powers and Ranges in All Elements(Pergamon Press, New York, 1977) Vol. 3.