

論文98-35D-12-8

몬테카를로 방식에 의한 스퍼터율 계산에 관한 연구

(Calculation of Sputter Yield using Monte Carlo Techniques)

潘用瓚*, 李濟熙*, 元太映*

(Yongchan Ban, Jaehee Lee, and Taeyoung Won)

요 약

본 논문에서는 몬테카를로 방식을 사용하여 이온의 에너지에 대한 타겟 원자의 스퍼터율(Sputter Yield), 이온의 주입 각도에 대한 스퍼터율, 이온의 주입에 따른 타겟 원자의 발산 분포를 3차원으로 시뮬레이션 하였다. 중(重)이온으로 Ar⁺을 사용하였고, 경(輕)이온으로 H⁺을 사용하여 10 eV에서 100 KeV 영역의 에너지에 따른 스퍼터율을 계산하였다. 또한, 스퍼터 타겟 물질로서 Cu, Al을 사용하여 계산하였고, 실험치와 일치함을 확인하였다. 스퍼터율은 입사 이온의 에너지가 증가함에 따라 증가하는 경향을 보이지만, 임계점 이후에는 점차적으로 감소하는 경향을 보였다. 중이온에 의한 스퍼터에서는 임계점이 10 KeV 영역이었고, 경이온에 의한 스퍼터에서는 1 KeV 이하 영역이었다. 또한, 이온의 주입 각도에 따라서 타겟의 스퍼터율은 점차적으로 증가하였고, 68° 부근에서 최대 스퍼터율을 기록하였다. 이온의 주입 각도에 따른 타겟 원자의 분포도에서는 각도가 커짐에 따라서 타겟 표면 법선 방향으로 방출되는 원자의 수가 많아짐을 확인하였다. 본 연구에서는, CRAY T3E 슈퍼컴퓨터에서 시뮬레이션을 수행하였으며, 구현된 몬테카를로 스퍼터 시뮬레이터의 GUI(Graphic User Interface) 환경을 구축하였다.

Abstract

In this paper, a rigorous three-dimensional Monte Carlo approach to simulate the sputter yield as a function of the incident ion energy and the incident angle as well as the atomic ejection distribution of the target is presented. The sputter yield of the target atom (Cu, Al) has been calculated for the different species of the incident atoms with the incident energy range of 10 eV ~ 100 KeV, which coincides with the previously reported experimental results. According to the simulation results, the calculated sputter yield tends to increase with the amount of the energy of the incident atoms. Our simulation revealed that the maximum sputter yield can be obtained for the incident atom with 10 KeV for the heavy ion, while the maximum sputter yield for the light ion is for the incident atoms with an energy less than 1 KeV. The sputter yield increases with angle of incidence and seems to have the maximum value at 68°. For angular distributions of the sputtered particle, the atoms in the direction normal to the surface increase with angle of incidence. Furthermore, we has conducted the parallel computation on CRAY T3E supercomputer and built a GUI(Graphic User Interface) system running the sputter simulator.

* 正會員, 仁荷大學校 電子電氣컴퓨터工學部
(School of Electrical and Computer Engineering, Inha University)

※ 본 연구는 1998년도 인하대학교 교내 연구비의 지원으로 수행되었습니다.

接受日字:1998年4月1日, 수정완료일:1998年11月3日

I. 서론

스퍼터 증착 방법은 다양한 물질을 쉽고 효율적으로 증착시킬 수 있다는 장점으로 박막 증착에 있어서 가장 필수적인 방법중의 하나이다. 이러한 스퍼터 공정의 장점 때문에 주요 반도체 공정에서는 스퍼터 공정을 채택하고 있으며, 개선된 스퍼터 리액터 시스템 개발에 박차를 가하고 있다. 그러나, 개발비용과 리스크(Risk)를 줄이기 위해서는 실제 라인에 웨이퍼를 투입하기 이전에 스퍼터 증착 원자의 분포를 모의 실험할 필요가 있다.

정확한 스퍼터 증착률을 예측하기 위해서는 타겟에서 방출되는 입자의 궤적 및 타겟 내에서 입자의 움직임을 알아야한다. 타겟 원자의 방출 분포를 계산하기 위해서, 많은 연구 기관에서는 해석 함수^[1]를 사용한 방법을 시도하였다. 그러나, 이러한 접근 방법은 시뮬레이션 수행 속도면에선 빠르나 물리적인 현상을 기반으로 하는 몬테 카를로 방법 및 분자 동역학(Molecular Dynamic) 방법에 비해 결과의 응용성 및 정확성이 크게 떨어지는 결점을 가지고 있다. 분자 동역학 방법은 원자 상호간의 힘에 관계하는 여러 가지 성분들로 입자들간의 모든 결합 에너지를 계산하므로 보다 정확하고 신뢰할 수 있는 결과를 얻을 수 있다. 그러나, 분자 동역학 방법의 특성상 방대한 양의 컴퓨터 메모리를 사용하게 되므로 효율면에서 크게 뒤떨어진다^{[2]-[3]}. 이에 반해, 이진 충돌 메커니즘을 이용하는 몬테카를로 방식은 컴퓨터의 효율면에서나 결과의 정확도면에서 다른 방법에 비하여 우수하며, 가장 널리 사용된다^{[4]-[5]}.

본 연구에서는, 차세대 반도체 소자 제작을 위한 핵심 단위 공정인 스퍼터 증착 공정 중, 타겟 원자의 방출 분포 및 스퍼터율의 계산을 몬테카를로 방식으로 구현하였다. 또한, 시뮬레이션의 수행 시간 단축을 위하여, CRAY T3E 슈퍼 컴퓨터를 이용한 병렬 컴퓨팅 방법을 적용하였으며, CPU 개수의 증가에 따라 시뮬레이션의 속도가 현저하게 증가함을 확인할 수 있었다. 비정질 타겟으로 입사한 이온의 충돌 및 에너지 손실 계산을 위하여, 핵 에너지 손실 메커니즘과 전자 에너지 손실 메커니즘을 모두 고려하였다. 또한, 본 연구 결과의 검증에 위해 실제 실험을 통한 데이터^[6]들과 비교하였으며, 여러 가지 타겟 입자의 스퍼터율을 주입되는 이온의 에너지 및 입사각의 함수로 시뮬

레이션 하였다. 본 연구의 결과에서는 수 eV의 낮은 에너지 뿐 만 아니라 수십 KeV의 높은 에너지를 가지는 이온을 주입시켰을 경우의 스퍼터율이 실험치와 일치함을 확인하였다. 특히, 본 논문에서는 스퍼터 증착을 포함하여 스퍼터 에칭 등에도 응용할 수 있는 스퍼터 타겟 입자의 방출 분포를 3차원으로 시뮬레이션하였고, 입력된 조건에 대한 스퍼터 공정 모의 실험을 수행하고 그 계산 결과를 매 시간 간격마다 원거리의 클라이언트에게 제공하는 GUI 환경을 구축하였다.

II. 3차원 몬테카를로 스퍼터 시뮬레이터의 구성

플라즈마 소스에서 입사한 이온과 충돌하여 방출되는 타겟 입자의 분포를 계산하기 위한 3차원 스퍼터 시뮬레이터의 전체적인 구성은 그림 1과 같다.

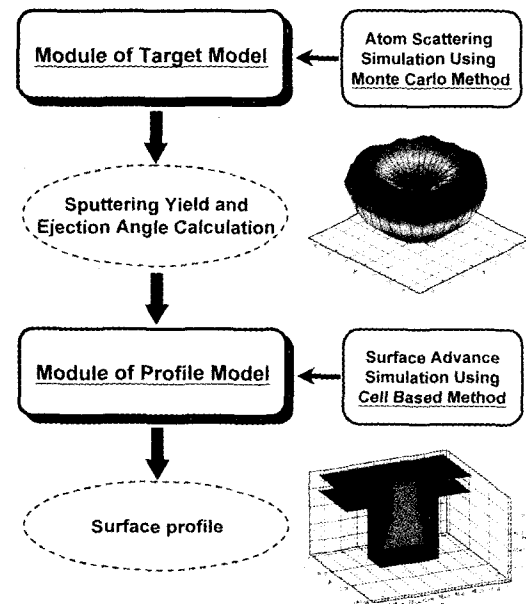


그림 1. 스퍼터 시뮬레이터의 구성을 보여주는 그림: 이온 및 타겟의 정보가 입력단에서 지정되고, 충돌에 의한 원자들의 자취 계산 및 재 산란 알고리즘을 수행한다

Fig. 1. Overview of the sputter simulation: The parameters of the ion and the target are set in input stage. Afterwards, an atom trajectory is calculated and a collision cascade is processed.

타겟 원자의 산란을 계산하는 모듈에서는 몬테 카를로 방식을 이용하여 원자간의 충돌을 계산하고, 연쇄 산

란 알고리즘을 사용하여 주입되는 이온의 에너지 및 각도에 따른 스퍼터율을 계산하게 된다. 또한, 타겟 외부로 방출되는 원자들의 방출각 및 자취를 계산하고, 계산된 결과를 다음 블록으로 넘겨주게 된다. 기판의 증착 형태를 형상화하는 모듈에서는 타겟에서 방출된 원자들의 방출각 및 스퍼터율 정보를 넘겨받아 최종 프로파일을 형성한다.

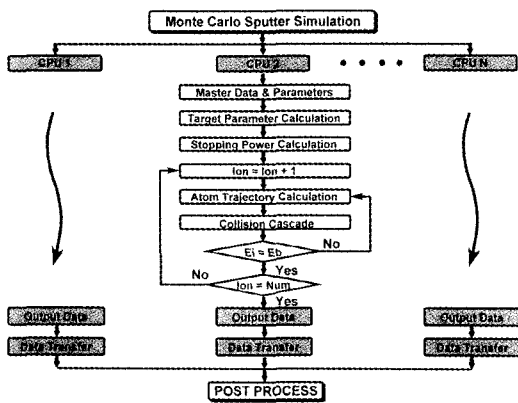


그림 2. 병렬 처리 방법에 의한 스퍼터 시뮬레이터의 흐름도: 타겟의 종류, 챔버내의 압력, RF 파워, 기판의 온도가 지정되면 각각의 프로세서는 독립적으로 계산을 수행하고, 최종적인 결과를 도출하기 위해 각각의 결과를 하나의 프로세서로 합산한다

Fig. 2. Workflow of sputter simulator by parallel processing: Once user define the species of target, the pressure of chamber, the RF power, and substrate temperature, our simulator starts the calculation. The calculated results in each processing unit are collected and post-processed for graphics

타겟 원자의 3차원 방출 분포를 계산하기 위해서 본 연구에서는 초고속 병렬 컴퓨팅 기술을 적용하였으며, 그림 2의 순서도에서 몬테카를로 방법을 이용한 병렬 처리 알고리즘을 도출하였다. 초기에 사용자의 공정조건을 입력받는다. 그런 다음, 병렬 처리를 위해 사용하고자 하는 프로세서를 설정하고 초기화시킨다. 각각 연산이 할당된 프로세서는 다른 프로세서와는 독립적으로 계산을 수행한다. 각각의 프로세서에서는 시뮬레이터의 입력 조건에 따라서 연쇄 충돌(Collision Cascade) 알고리즘에 의해 타겟 내부에서의 충돌 계산을 수행한다. 지정된 개수만큼의 연산을 끝내면 그 결과를 중앙 프로세서에 전송하고, 중앙 프로세서는

전송 받은 데이터를 적절히 처리한 다음 후처리계로 데이터를 전송한다. 이렇게 해서 계산된 결과는 그림 3에서 보는 바와 같이 스퍼터 GUI 시스템 상에 자동으로 도시된다.

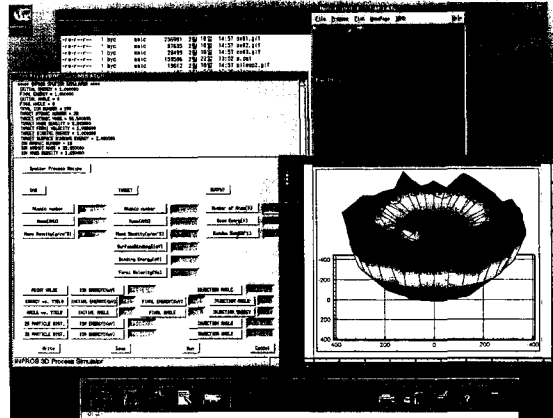


그림 3. INPROS에 기반을 둔 스퍼터 시뮬레이터의 GUI: INPROS상의 스퍼터 시뮬레이터에 접속하여 시뮬레이션을 수행하면, 시뮬레이터는 타겟 원자의 3차원 방출 분포를 계산하여 자동으로 화면에 결과를 도시한다

Fig. 3. GUI of sputter simulator planted at INPROS: INPROS offers GUI, which enables the user to interface the simulation system just put the button. Then the simulator calculates the 3D distribution of sputtered atoms and demonstrates the calculation result graphically.

스퍼터 GUI 모듈은 본 연구실에서 개발한 INPROS[®](INha PROcess Simulator)에 기반을 두어 제작되었으며, 클라이언트가 실시간(Real Time)으로 동화상을 받아 볼 수 있도록 그래픽 기능을 개선하였다. 또한, 상기 스퍼터 GUI 모듈은 유닉스 윈도우즈 시스템에서 구축되었으며, PC 환경으로의 개발도 수행 중에 있다. 그림 3에서 보는바와 같이 사용자가 주입 이온에 대한 정보와 타겟에 대한 정보를 기록하고 원하는 결과에 대한 형태를 지정한다. 본 시뮬레이터는 디폴트(Default)로 입사 이온은 Ar⁺, 타겟은 Cu를 정의하고 있으며, 타겟 원자의 방출 분포를 3차원으로 보여준다. 부가하여, 입사 이온의 에너지에 따른 스퍼터율, 이온의 주입 각도에 따른 스퍼터율, 표면에서 방출되는 타겟 원자의 2차원 분포도 및 3차원 분포도의 계산을 위한 명령을 실행하면 각각의 결과를 얻을 수 있다.

III. 타겟 내부에서의 원자 산란 메커니즘

1. 스퍼터 타겟에서의 원자 산란 모델

본 시뮬레이터에서는 입자들의 충돌 경우마다 격자 에너지(Binding Energy)를 충돌을 받은 원자의 에너지에서 감하게 하였다. 격자 에너지는 충돌을 받은 원자가 자신의 격자 위치에서 벗어날 경우에 필요한 에너지로 간극(Vacancy)을 형성하는데 필요한 에너지와 같다. 움직이는 입자와 정지 원자간의 에너지 손실은 핵 충돌에 의한 산란(Nuclear Scattering)의 영향으로 발생하는 탄성 충돌 에너지 손실과 입자와 전자간의 충돌로 발생하는 비 탄성 충돌 에너지 손실이 있다^[7]. 타겟 원자는 핵을 둘러싸는 외곽의 전자들로 가려져(Electronic Screening)있는데, 주입 이온과 타겟 입자 사이의 충돌은 입자 이온의 에너지와 전자 영사(Screening)도에 따라서 결정된다. 핵 에너지 전달 충돌은 이온과 타겟 원자 핵의 충돌이고, 이들에 의해서만 이온과 정지 원자간의 산란각이 바뀌며, 완전 탄성 충돌 메커니즘으로 설명된다. 또한, 전자 에너지 전달 충돌은 이온과 전자간의 충돌로써 정지 원자의 핵 주위에 위치하는 전자들과의 충돌로 생각해 볼 수 있다. 이들은 비탄성 충돌로 간주되며, 전자와의 충돌에선 주입 입자의 산란각은 변하지 않고, 단지 에너지 전달만이 관여한다. 전술한 두 가지 충돌 메커니즘은 서로 독립하다. 따라서 입자들은 핵 충돌에서 불연속적인 양으로 에너지를 잃고, 전자의 상호작용으로 연속적인 값으로 에너지를 잃게 된다. 충돌에 관한 상기 메커니즘은 격자를 떠난 원자와 다른 타겟 원자의 충돌에서도 동등하게 적용된다.

입자들은 핵 이중 충돌 때문에 방향이 변하고 충돌을 하는 과정에서 직선의 자유 비행 경로(Free Flight Path)로 이동하며, 핵과 전자 에너지 손실의 결과로 에너지가 감소한다^[8]. 각각의 많은 이온들과 입자들은 정지력 이하로 에너지가 떨어지거나 입자의 위치가 타겟의 외부에 위치할 때 종료된다. 모든 과정을 마친 후 타겟 원자의 스퍼터율 분포를 도출하게 된다.

2. 연쇄 충돌(Collision Cascade) 알고리즘

본 스퍼터 시뮬레이터의 연쇄충돌(Collision Cascade) 알고리즘은 그림 4에서와 같이 입자 이온과 충돌하여 생긴 입자(Knock-on Atom)가 타겟 내에서 멈추거나, 외부로 발산되어 더 이상 계산을 수행할 수 없을 때까지 계속하여 수행한다. 즉, 충돌을 받은 입자

는 다른 원자에 충돌을 일으키고 이런 과정이 연속적으로 수행된다. 이때, 에너지를 가지고 충돌을 일으키는 원자를 1차적인 충돌 원자(Primary Knock-on Atom: PKA)로 정의하고, PKA의 충돌로 에너지를 받은 원자를 2차적인 충돌 원자(Secondary Knock-on Atom: SKA)라 정의하기로 한다.

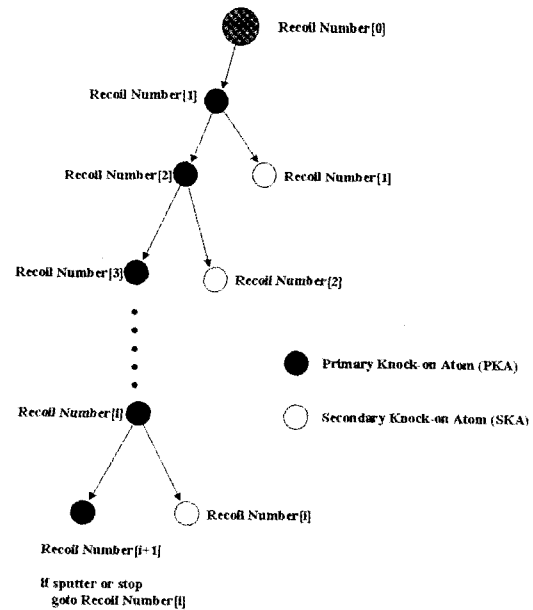


그림 4. 입사한 이온과 타겟 원자간의 연쇄 충돌 과정: 1차적인 충돌 원자(PKA)는 타겟 내부에서 2차적인 충돌 원자(SKA)와 연속적인 충돌을 일으킨다

Fig. 4. The scheme of the collision cascade process shows that the primary knock-on atom marked black circle(PKA) successively collide with the secondary knock-on atom marked white circle(SKA) in the target.

이온에 의해서 처음 충돌을 받은 원자는 $i=1$ 이란 라벨을 붙여지고, 새로운 원자와의 충돌 후 PKA는 $i+1$ 로, SKA는 i 로 라벨이 붙여진다. 만일 PKA가 스퍼터 되었거나, 타겟 원자의 격자 에너지 보다 작아져서 더 이상 연쇄충돌을 수행하지 않는다면, 프로그램은 다시 라벨 i 로 가서 이전의 과정을 다시 수행하게 된다. 이때에, SKA는 PKA가 되어 PKA와 같은 방법으로 계산을 수행하게 된다. 이런 과정 후에 최종적으로 $i=0$ 까지 (이온 자신으로) 도달하게 된다. 그 후에 이온은 다음 원자와 충돌을 일으켜 전술한 과정을 다시 수행하게 된다. 이때, 각각의 원자들은 타겟 표면에서

의 깊이, 현재의 에너지, 위치, 움직이는 방향에 대한 정보를 가지고 이동한다.

IV. 결과 및 분석

1. 입사 이온의 주입 각도에 따른 타겟 원자의 3차원적인 방출 분포

큰 종횡비(Aspect Ratio)를 갖는 소자의 스퍼터 증착 공정에 있어서 균일한 표면 형상을 얻기 위해서, 타겟에서 방출되는 입자의 분포는 중요한 관심 사항이 된다. 특히, 토폴그래피의 기하학적인 그림자 효과(Shadowing Effect)가 문제시되고 있는 스퍼터 공정에서는 타겟에서 방출되는 입자들의 분포를 이해하여야 한다. 타겟은 비정질이고 타겟 원자의 질량, 원자 번호, 원자 전위, 원자 밀도, 표면 구속 에너지(Surface Binding Energy) 등과 같은 타겟에서의 여러 가지 정보는 시뮬레이터의 입력 함수로써 정의하였다.

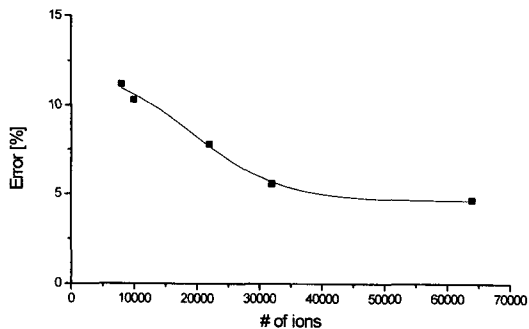
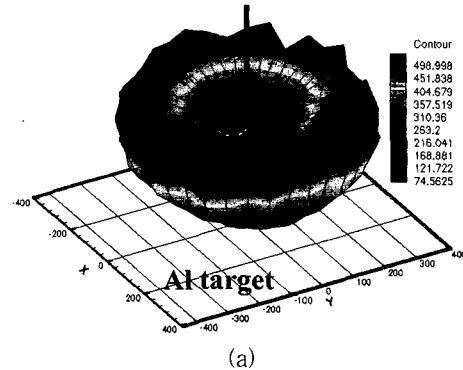


그림 5. 이온의 개수를 증가시켰을 때 감소되는 에러의 변화: 입사되는 이온의 개수가 32,000개 이상에서는 에러의 변화가 거의 없음을 알 수 있다.

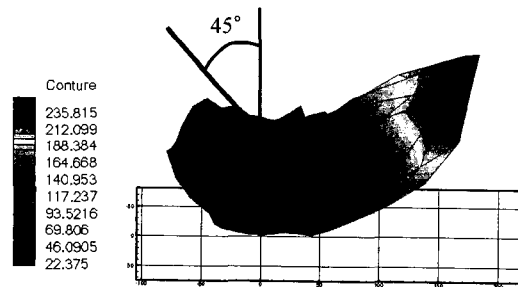
Fig. 5. The error dependency on the # of ions: the calculation error does not improve, once the # of ions be went over 32,000.

몬테카를로 방식의 수치계산에서는 입사 이온의 개수를 증가시킬수록 보다 정확한 결과를 얻을 수 있다. 그러나, 그에 따른 계산시간이 크게 증가하므로 결과의 신뢰성을 보장받는 한계 내에서 최적화 된 이온의 개수를 얻어내야 한다. 그림 5에 이온의 개수를 증가시켰을 때 감소되는 에러의 변화를 도시하였다. 사용된 에러 값은 평균 분포에 대한 표준편차의 비율로 정의하였다. 그림에 도시된 바와 같이 10,000개의 이온

에서 이온 수가 증가할수록 발생하는 에러의 수는 선형적으로 감소하다가 32,000개 이상의 이온에서는 에러의 변화가 거의 없어진다. 따라서, 32,000개 이상의 이온에서는 동일한 결과를 얻었고, 32,000개의 이온 주입이 계산의 효율을 최대한 높일 수 있는 최적치임을 확인하였다.



(a)



(b)

그림 6. 1 KeV의 에너지를 가진 Ar⁺ 이온의 주입 각도 [°]에 대한 타겟 원자의 3차원 방출 [#] 분포를 보여주는 그림: (a)에서는 타겟 표면 법선 방향에 대해 45°의 각도로 방출되는 입자의 개수가 가장 많고, 모든 방향에 대해 대칭적인 분포를 나타내는 반면, (b)에서는 주입되는 이온과 반대 방향으로 가장 많이 타겟 원자가 방출되었으며, 표면 법선 방향에 대해 50°의 각도로 계산되었다.

Fig. 6. The bird's eyes view of three-dimensional angular distributions of target atoms for Ar⁺ ion with fixed incident energy of 1 KeV: Figure (a) revealed that the maximum ejection occurred at 45° from the axis, and no phi dependence was observed. In the meanwhile, figure (b) revealed that the maximum ejection occurs at 50° from the axis in the opposite direction.

이러한 최적 조건을 바탕으로 하여, 1 KeV의 에너지를 갖는 Ar⁺ 이온의 주입에 대한 Cu 원자의 3차원

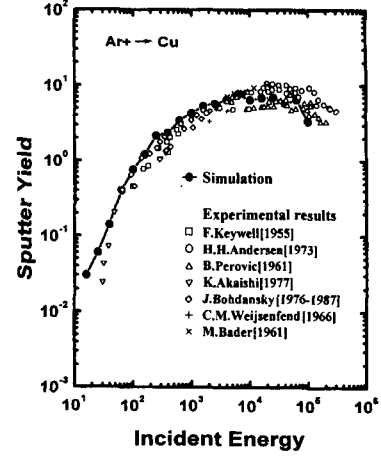
발산 분포를 그림 6에 도시하였다. 그림 6의 (a)는 표면에 수직으로 입사하는 이온에 대한 타겟 원자의 분포를 나타내고, (b)는 45°의 각도로 입사하는 이온에 대한 타겟 원자의 3차원적인 분포를 나타낸다. 또한, 그림(a)와 (b)에서 x-y 평면은 타겟 표면을 표시하고, 원점은 이온이 입사되는 지점을 나타낸다. 이때, 원점에서 분포면까지의 거리가 특정 지점으로 방출되는 산란각의 개수가 된다. 본 시뮬레이터의 결과가 시사하는 바와 같이, 그림 6의 (a)에서는 방위각에 대해 균일한 분포를 보이며, 표면 법선 벡터에 대해 산란각 45° 부근에서 가장 많은 분포를 나타냈다. 이에 대해, 그림 6의 (b)는 이온 진행의 반대 방향으로 가장 많은 타겟 원자의 분포를 보였으며, 타겟 표면 법선 방향에 대해 50°의 각도로 방출되는 성분이 가장 많음을 알 수 있었다.

2. 입사 이온의 에너지에 따른 스퍼터율 분포

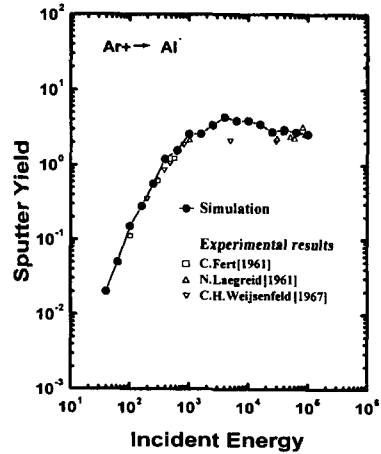
본 논문에서는 스퍼터 타겟으로 입사하는 이온의 에너지와 종류에 따른 여러 가지 타겟의 스퍼터율을 몬테카를로 방식으로 계산하였다. 스퍼터율은 단위 입사 이온에 대한 타겟 방출 원자의 수로 정의된다. 스퍼터 타겟으로는 Cu, Al을 사용하였고, 입사하는 이온은 중(重)이온으로 Ar⁺, 경(輕)이온으로 H⁺를 사용하여 각각 시뮬레이션 하였다. 입사 이온의 에너지를 10 eV에서 100 KeV까지 수행하였는데 이온의 에너지가 커질수록 충돌로 인한 재 산란(Recoil)이 많아지므로 계산을 위한 수행 시간이 기하급수로 증가하게 된다.

그림 7는 수직으로 입사하는 Ar⁺ 이온의 에너지에 대한 타겟 원자의 스퍼터율을 나타낸다. 본 결과에서 에너지의 단위는 eV이다. 각각의 결과에서 특정 에너지를 가지고 입사하는 이온의 개수는 100개이며, 결과에 나타난 스퍼터율은 입사 이온 각각의 스퍼터율 평균값이 된다. 에너지를 가지고 입사하는 이온은 타겟 원자와 충돌을 일으킨다. 이 때, 이온은 핵 에너지 전달 및 전자 에너지 전달 과정으로 자신의 에너지를 잃고 다시 새로운 운동을 시작한다. 자신의 격자 에너지보다 큰 에너지를 받은 타겟 원자는 다른 타겟 원자와 같은 과정의 충돌을 겪게 된다. 본 논문의 계산 결과에 나타난 바와 같이 입사 이온의 에너지가 커질수록 타겟에서 발산되는 입자의 분포도 많아진다. 이온의 에너지가 커짐에 따라 타겟으로 전달되는 에너지도 커지게 되고, 연쇄 충돌 효과가 많아짐으로 스퍼터율이

증가하게 된다.



(a)



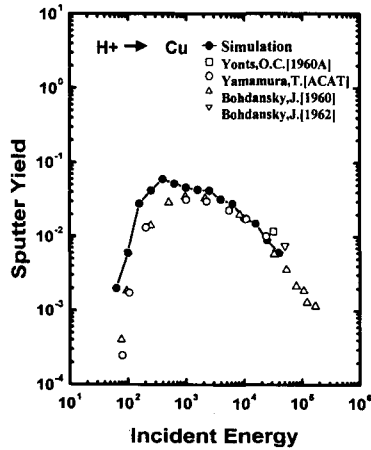
(b)

그림 7. 수직으로 입사하는 Ar 이온의 에너지 [eV]에 대한 타겟 원자의 스퍼터율 [#ion] 분포를 보여주는 그림: (a) Cu 타겟에 Ar⁺이 입사하는 경우 입사 에너지 변화에 따른 스퍼터율의 의존성을 보여주고 있다. 에너지 10 KeV 일 때 최대값을 나타내며 이는 실험치와 일치함을 알 수 있다. (b) Al 타겟

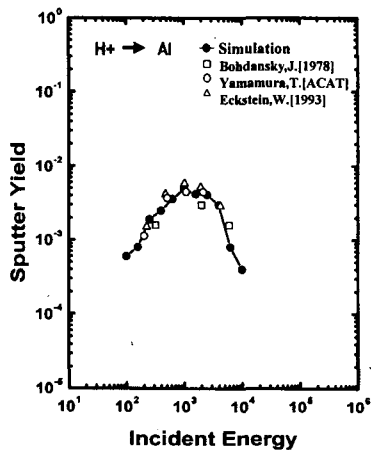
Fig. 7. Sputtering yield [#ion] distributions versus the incident energy [eV] of Ar⁺ ion at normal incidence. (a) It is shown that the sputter yield of Cu target depend upon the Ar⁺ ion energy and the maximum sputter yield is about 10 KeV. This distribution coincides with the previously reported experimental results (b) Al target

그러나, 높은 에너지 영역(10 KeV 이상)에서는 스퍼터율이 점차 감소하는 경향을 보였는데, 입사 에너지가

커지면 산란각에는 영향을 미치지 않는 전자 에너지 손실이 핵 에너지 손실에 비해서 더욱 커지므로^[9] 이온은 타겟으로 더욱 깊이 들어가고 타겟 원자의 재 산란은 타겟 내부에서 발생되므로 스퍼터율은 작게 된다.



(a)



(b)

그림 8. 수직으로 입사하는 H 이온의 에너지 [eV] 에 대한 타겟 원자의 스퍼터율 [#ion] 분포를 보여주는 그림: (a) Cu 타겟에 H 이온이 입사하는 경우 입사 에너지 변화에 따른 스퍼터율의 의존성을 보여주고 있다. 에너지가 1 KeV 보다 작은 영역에서 최대값을 나타내며 이는 실험치와 일치함을 알 수 있다. (b) Al 타겟

Fig. 8. Sputtering yield [#ion] distribution versus the incident energy [eV] of H⁺ ion at normal incidence: (a) It is shown that the sputter yield of Cu target depend upon the H⁺ ion energy and the maximum sputter yield is obtained for the incident hydrogen ion with energy of less than 1 KeV. This distribution coincides with the previously reported experimental results. (b) Al target

본 시뮬레이터에서 수행한 Ar⁺ 입사 이온의 에너지에 대한 Cu, Al 타겟의 스퍼터율 분포는 실험 결과와 거의 일치함을 확인하였다.

중이온인 Ar⁺의 결과와 마찬가지로 그림 8에서는 경이온인 H⁺의 입사 에너지에 대한 Cu, Al 타겟의 스퍼터율 분포를 계산하였다. Ar⁺은 입사 에너지가 10 KeV인 영역에서 스퍼터율의 최대치를 보였으나 경이온인 H⁺는 상대적으로 스퍼터율도 작았고, 입사 에너지가 1 KeV 이하 영역에서 최대치를 확인하였다. 일반적으로 에너지가 증가함에 따라서 핵 에너지 손실은 작아지고 전자 에너지 손실은 커진다. 특히, 무게가 작은 이온은 무게가 큰 이온에 비하여 전자 에너지 손실의 영향이 더욱 크게 나타난다. 예를 들면, 붕소(Boron)는 에너지가 10 KeV에서 전자 에너지 손실과 핵 에너지 손실이 같게 되고, 인(Phosphorus)은 대략 150 KeV에서 같게 된다^[9]. 경이온에 대한 스퍼터율은 전술한 이유로 작은 값을 기록하게 된다.

3. 입사 이온의 주입 각도에 따른 스퍼터율 분포

스퍼터 공정의 단점 중에 하나는 비교적 증착 속도가 느린 점이다. 이러한 단점을 극복하기 위해서는 이온의 주입 각도에 변화를 주어 스퍼터율을 더욱 증가시켜 주어야 한다. 또한, 스퍼터 에칭이나 바이어스 스퍼터링(Bias Sputtering) 공정에서 이온의 주입각에 따른 스퍼터율의 변화는 매우 중요한 문제로 지적된다. 그림 9은 1 KeV의 에너지를 가진 Ar⁺ 이온을 Cu 타겟에 입사 시켰을 경우에 입사되는 이온의 주입각에 따른 스퍼터율 분포도이다. 이온의 입사각은 타겟 법선 방향을 기준으로한 각도로 정의되며, 그림 9의 오른쪽 결과는 주입각에 따른 스퍼터율 분포를, 왼쪽 결과는 주입되는 이온이 타겟과 충돌 후 반사되어 나올 확률을 나타낸다. 결과에서 시사하는 바와 같이 주입되는 이온의 각도가 커질수록 스퍼터율도 커졌고, 주입각 68°에서 스퍼터율의 최대치를 기록하였다. 그러나, 68° 이상의 입사각에 대해서는 오히려 스퍼터율이 감소함을 확인하였다. 이러한 결과는 경이온 및 중이온에 공통적으로 나타나는 현상으로써, 이온의 입사각도가 커지면 타겟 입자들이 더 많이 방출되나, 이온의 입사각이 커짐에 따라서 타겟 내부로 입사되지 않고 외부로 반사되는 이온의 개수가 많아지므로 스퍼터율이 반대로 감소함을 시뮬레이션 결과를 통하여 확인하였다.

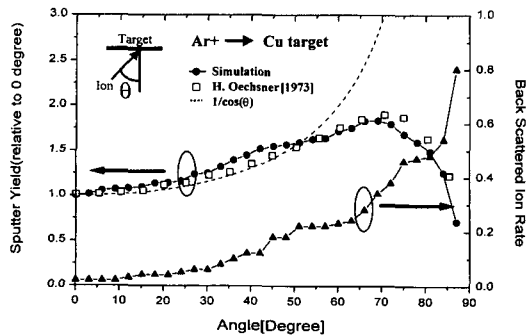


그림 9. 1 KeV의 에너지를 가진 Ar^+ 이온의 주입 각도 $[\circ]$ 에 대한 타겟 원자의 스퍼터율 $[\#/ion]$ 분포를 보여주는 그림: 입사 이온의 주입 각도가 커짐에 따라 스퍼터율은 점차 증가하고 68° 에서 최대치를 기록하며 이후의 주입 각에서 빠르게 감소하고 있다.

Fig. 9. Sputtering yield $[\#/ion]$ distribution versus the incident angle $[\circ]$ of Ar^+ ion at 1 KeV: the sputter yield increases with angle of incidence and seems to have the maximum value at 68° , while it decreases rapidly for the larger angle due to the reflection of incident ions.

V. 결 론

본 논문에서는 몬테카를로 방식을 사용하여 이온의 에너지 및 주입 각도에 따른 스퍼터율을 계산하고, 이온의 주입에 따른 타겟 원자의 발산 분포를 3차원적으로 시뮬레이션 하였다. 이온으로는 중이온으로 Ar^+ 을 사용하였고, 경이온으로 H^+ 을 사용하여 각각의 에너지에 따른 스퍼터율을 계산하였다. 또한, 스퍼터 타겟 물질로서 Cu, Al을 사용하여 실험치와 일치함을 확인하였다. 본 논문의 결과에서 시사하는 바와 같이 스퍼터율은 에너지의 증가에 따라서 증가하는 경향을 보였고 임계 지점 이상에서는 점차적으로 감소하는 경향을 보였다. 임계 지점으로 중이온에 의한 스퍼터에서는 10 KeV 영역이었고, 경이온에 의한 스퍼터에서는 1 KeV 이하 영역이었다. 또한, 이온의 주입 각도에 따라서 타겟의 스퍼터율은 점차적으로 증가하였고, 70° 부근에서 최대 스퍼터율을 기록하였다. 타겟 원자의 방출 분포를 구형하기 위해 본 연구에서는 32,000개의 이온을 최적의 입사 개수로 결정하였고, 32개의 CPU를 사용하여 CRAY T3E 슈퍼 컴퓨터로 수행하였다. 이온을 수직으로 입사 시켰을 경우에 타겟 표면 법선 방향에 대해 45° 에서 최대 방출 분포를 보였으며, 모

든 방위각으로 균일한 분포를 확인하였다. 또한, 45° 입사의 경우에는 이온 진행 방향의 반대 방향으로 50° 의 최대 방출 각도 분포를 보였다. 본 시뮬레이터는 스퍼터 에칭 공정, 바이어스 스퍼터링 시스템, 이온 빔 스퍼터링 시스템 등 여러 가지 공정에 적용할 수 있으며, 방출되는 타겟 원자의 분포를 바탕으로 기판의 토포그래피(Topography)를 예측하는 표면 진화 시뮬레이션에도 적용할 수 있을 것으로 사료된다.

참 고 문 헌

- [1] D. S. Bang, J. P. McVittie, and K. C. Saraswat, "Three Dimensional PVD Virtual Reactor for VLSI Metallization," IEEE IEDM, 1995.
- [2] Satish D. Athavale and Demetre J. Economou, "Molecular dynamics simulation of atomic layer etching of silicon," J. Vac. Sci. Technol. A 13(3), pp. 966, 1995.
- [3] H. Yamada, T. Shinmura, and T. Ohta, "A Sputter Equipment Simulation System Including Molecular Dynamics Target Atom Scattering Model," IEEE IEDM, 1995.
- [4] J. P. Biersack, "Sputtering Studies with the Monte Carlo Program TRIM.SP," Appl. Phys. A 34, pp. 73-94, 1984.
- [5] Y. Yamamura and M. Ishida, "Monte Carlo simulation of the thermalization of sputtered atoms and reflected atoms in the magnetron sputtering discharge," J. Vac. Sci. Technol. A 13(1), pp. 101, 1995.
- [6] Y. Yamamura et. al, "Energy Dependence of Ion-sputtering Yields from Monatomic Solids at Normal Incidence," Atomic data and nuclear tables 62, pp. 149-153, 1996.
- [7] J. F. Ziegler et. al, "The Stopping and Range of Ions in Solids," vol1, New-York: Pergamon, 1985.
- [8] 반응찬, 이제희, 윤상호, 권오섭, 김연태, 원태영, "몬테카를로 계산 방식에 의한 RF 플라즈마 에칭 시스템에서의 이온 분포 계산," 전자공학회논문지, 제35권 D편 제5호, pp. 472-480, 1998
- [9] B. Smith, "Ion Implantation Range Data for Silicon and Germanium Device Te-

chnologies," Research Studies, Forest Grove, Oregon, 1977.

저 자 소 개



潘 用 瓚(正會員)

1974년 7월 7일생. 1997년 인하대학교 전자재료공학과(공학사), 1997년 ~ 현재 인하대학교 전자재료공학과 석사과정, 주관심 분야는 반도체 공정 물리, 시뮬레이션 등임



李 濟 熙(正會員)

1968년 10월 5일 생. 1992년 인하대학교 응용물리학과(공학사). 1994년 인하대학교 전자재료공학과(공학석사). 1994년 ~ 현재 인하대학교 전자재료공학과 박사과정. 주관심 분야는 반도체 소자 및 공정, 시뮬레이션 등임

元 太 映(正會員) 第 35卷 D編 第 6號 參照