

이온빔 몬테 카를로 시뮬레이션 프로그램 개발 및 집속 이온빔 공정 해석

Development of Ion Beam Monte Carlo Simulation and Analysis of Focused Ion Beam Processing

김흥배^{1,✉}
Heung-Bae Kim^{1,✉}

1 (주)세크 (SEC Co., LTD)

✉ Corresponding author: heungbaekim@gmail.com, Tel: 031-8006-8787

Manuscript received: 2011.8.11 / Revised: 2011.11.29 / Accepted: 2011.12.17

Two of fundamental approaches that can be used to understand ion-solid interaction are Monte Carlo (MC) and Molecular Dynamic (MD) simulations. For the simplicity of simulation Monte Carlo simulation method is widely preferred. In this paper, basic consideration and algorithm of Monte Carlo simulation will be presented as well as simulation results. Sputtering caused by incident ion beam will be discussed with distribution of sputtered particles and their energy distributions. Redeposition of sputtered particles that are experienced refraction at the substrate-vacuum interface additionally presented. In addition, reflection of incident ions with reflection coefficient will be presented together with spatial and energy distributions. This Monte Carlo simulation will be useful in simulating and describing ion beam related processes such as ion beam induced deposition/etching process, local nano-scale distribution of focused ion beam implanted ions, and ion microscope imaging process etc.

Key Words: Focused Ion Beam (집속 이온빔), Microfabrication (마이크로 가공), Redeposition (재증착), Monte Carlo Simulation (몬테 카를로 시뮬레이션)

1. 서론

기계공학에서 이온빔의 사용은 마이크로/나노 영역에서의 가공 및 표면처리 등의 다양한 응용분야에서 그 활용범위를 확장하고 하고 있으며 나아가 그 중요성 또한 크게 부각되고 있다.¹ 일반적으로 이온빔 관련 연구는 물리학 및 반도체 공학을 필두로 반도체 공학과 연계하여 전자공학에서 주로 연구가 이루어져 왔으나 최근 기계공학에서 관련 장비의 개발을 위하여 이온빔 이론에 대해 관심을 가지고 다양한 연구가 시도되고 있다.

특히 기존의 가공영역에서 이를 수 없었던 서

브 마이크로(Sub-micro) 및 나노(Nano) 영역의 정밀 가공과 이를 이용하여 서브 마이크로 영역에서의 금형 가공 그리고 마이크로 가공용 공구를 제작하려는 시도가 많이 이루어지고 있다.^{1,2}

이온은 광자(Photon) 및 전자(Electron)와 다르게 열 가공(Thermal process)이 아니라 가공물에 상대적으로 높은 질량을 가진 이온을 입사하여 이루어지는 원자들의 탈출, 즉 스퍼터링(Sputtering)을 직접 이용하므로 포토레지스트(Photoresist)의 사용이 불필요하고 이를 도포하고 제거하는 전 및 후 처리(Pre- and post- processing)가 불필요하다는 장점이 있어 이를 이용한 다양한 시도가 이루어지고 있다.

이온빔을 이용한 가공공정 중에는 1 차적인 효과와 2 차적인 효과로 나뉘어지는데, 1 차적인 효과에는 에너지를 가진 이온들에 의해 발생하는 스퍼터링과 정밀가공에서 문제점으로 지적되고 있는 재증착(redeposition) 이다.

이러한 1 차효과에 대한 연구는 Kim^{4,6} 등이 이온빔과 모재의 상호작용을 연구하여 2 차원 및 3 차원 영역에서 스퍼터링과 재증착을 고려한 모델을 확립하고 실험을 통하여 검증하였다. 2 차 효과는 입사 이온빔의 벽면에서의 반사에 의한 2 차 스퍼터링과 이차 스퍼터링에 의해 탈출한 원자들에 의한 2 차 재증착을 의미한다.

많은 연구자들 의해 이온의 입사와 탈락한 원자들에 의한 재증착은 1 차적인 범위 내에서 주로 연구가 이루어졌으며, 2 차적인 효과를 고려한 연구가 다소 미흡한 실정이다. 이러한 원인은 일반적인 이온빔의 사용은 2 차효과를 무시해도 되는 영역에서 주로 이루어져왔거나 2 차효과를 고려하지 않도록 회피하여 사용되어 왔기 때문이다. 또한 2 차 효과는 1 차 효과에 비해 그 영향이 작기 때문이다.

그러나 이러한 2 차 효과에 의해 발생하는 문제 중에서 벽면에 반사된 이온이 다른 벽면에 충돌하여 야기하는 2 차 스퍼터링이 가장 큰 문제로 지적되고 있다. 특히 대략 70 도 이상의 측벽에서 다수의 입사이온들은 반사를 경험하고 바닥에서 2 차 가공을 유발하는데 이러한 마이크로 트렌칭 효과(Micro trenching effect)가 이온빔을 이용한 정밀가공에서 재증착 문제에 이어 또 다른 문제로 지적되고 있다.

이러한 2 차 효과를 정밀하게 고려하려면 이온과 모재의 상호작용에 대한 연구가 선행되어야 한다. 일반적으로 이체 충돌(Binary collision) 개념을 사용한 몬테 카를로(Monte Carlo) 방법과 분자 동역학(Molecular dynamics)을 이용한 방법이 주로 사용되고 있다. 이중 분자 동역학 방법은 이온과 모재와의 상호작용을 시간의 함수로 정확하게 계산할 수 있다는 장점이 있으나 계산시간이 다소 많이 소비된다는 문제가 있다.⁷ 몬테 카를로 방법은 통계적인 방법으로 계산시간이 빠르고 통계적으로 신뢰할 만한 결과를 볼 수 있다는 장점이 있다.⁸

또한 이온빔과 보조 가스를 이용한 증착⁹ 및 에칭¹⁰ 공정에서 빔의 가스산란 문제, 산란된 입사 이온빔의 분포, 그리고 이차 이온 및 이온에 의한 이차 전자의 발생을 고려하여야 하기 때문에 몬테

카를로 분석은 필수적이다. 최근에는 이온빔의 국부적인 주입과 추가적인 에칭 공정을 이용하여 나노 사이즈를 가지는 구조물 제작에 관한 연구가 진행되고 있다^{4,6,11-14} 이때 이온빔의 직경과 주어진 이온빔 직경에 의해 주입된 이온의 정확한 분포를 파악하지 못하면 연구를 진행하기 어렵기 때문에 몬테 카를로 방법이 필요하다.

본 연구에서는 이온빔 몬테 카를로 시뮬레이션 프로그램을 개발하고 이온빔에 의한 1 차 효과와 2 차 효과에 대한 분석을 수행하였다. 이온에 의해 탈락한 원자들의 공간 및 에너지 분포와 반사된 이온들의 공간 및 에너지 분포에 대한 분석을 수행하였다.

본 연구에서 아래의 3 가지 세부 연구가 수행되었다.

- (1) 이온빔 몬테 카를로 시뮬레이션 프로그램 개발
- (2) 개발 된 툴을 이용한 탈락 원자들의 공간 및 에너지 분포 분석
- (3) 개발 된 툴을 이용한 반사 이온들의 공간 및 에너지 분포 분석

전반적인 이온빔 장비의 구성, 이온빔과 모재의 상호작용에 대한 간략한 설명, 그리고 몬테 카를로 시뮬레이션에 대한 설명이 2 장에서 이루어지며, 개발된 툴을 이용한 이온-모재 상호작용에 대한 분석이 3 장에서 논의된다.

2. 몬테 카를로 시뮬레이션

2.1 이온모재 상호작용

현재 집속이온빔에 장착된 대부분의 이온원(ion source)은 갈륨 액체 금속 이온원(Liquid metal ion sources, LMIS)으로 높은 밝기(Brightness)를 가지는 포인트 소스에 가까운 특성이 있다. 높은 밝기의 특성이란 입체각(Solid angle) 내에서 높은 전류밀도(Current density)를 가지는 것으로 이미징(Imaging) 및 최종 집속 이온빔의 특성에 높은 영향을 미치는 변수이다. 소스로부터 발생된 이온들을 정전렌즈(Static lens)를 이용하여 집속하게 되는데, Fig 1 에는 전체적인 집속이온빔 경통(column)의 구성과 각 단계에서 이온들이 통과하는 시간을 표시하고 있다.

충분한 속도로 가속된 이온들은 모재와의 충돌

로 에너지를 점차 잃으면서 모재 내부로 진입하게 된다. 모재 위에 설치된 팔극자(Octupole)는 집속된 빔의 경로를 모재 위의 원하는 위치로 변경하며 스캔(Scanning)하게 된다. 이온들은 경통을 통과하는 동안 가속되어 운동에너지를 얻게 되고 이 에너지를 이용하여 모재 원자와의 연속 충돌을 경험하며 모재 안으로 진입하게 된다.

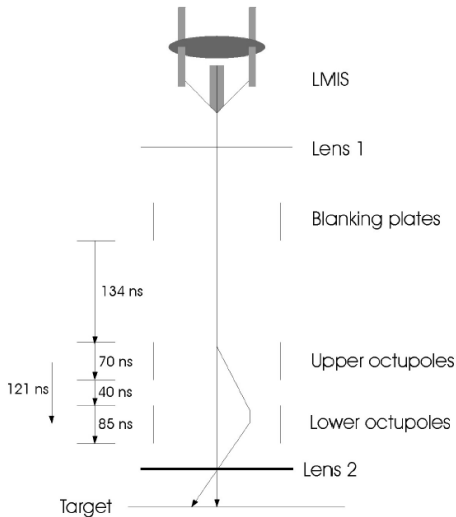


Fig. 1 Schematic view of focused ion beam optical column. Approximated times of flight between parts are indicated¹⁵

모재 내부에서 이온은 점차 에너지를 잃으며 모재 내부로 진입하게 되며 최종적으로 모재 내부에서 정지하게 된다. 이때 이온의 정지는 크게 두 가지 효과로 분리되는데, 모재 원자의 핵과 이온의 탄성충돌에 의한 핵 정지력(nuclear stopping)과 모재 원자의 전자들과의 비탄성 충돌로 인한 전자 정지(Electronic stopping)이다. 이때 입사 이온의 속도가 크지 않아 비 상대론적 입자(Non-relativistic particle)로 취급할 수 있다면, 즉 일반적으로 이온의 가속에너지가 약 50keV 이하 라면 이온과 모재와의 충돌은 이체 탄성 충돌(Two-body elastic collision)로 간주하여 계산할 수 있다. 이체 충돌은 연속된 충돌간의 거리인 평균자유경로(Mean free path)가 모재 원자들간의 간격보다 충분히 클 경우에 타당하다. 하지만 모재 속에서 점차 속도를 잃으며 진행되는 이온의 속도가 충분히 작아진다면, 즉 1keV 이하로 작아진다면 평균자유경로가 작아져서 다체 충돌(Multi-body collision)이 더 중요하게

작용한다.

에너지를 가지고 입사한 이온들은 모재원자와 상호 작용하며 연속적인 충돌을 경험하게 된다. 연속 충돌의 결과로 모재 원자들은 자리에서 이탈하게 되고 일부 원자들은 모재의 외부로 탈락하게 된다. 이것을 스퍼터링(Sputtering)이라 하며 입사한 이온에 대해 탈락한 원자들의 비를 스퍼터율이라 한다. 스퍼터율은 이온의 입사각도에 따라 크게 달라지는데, 수직입사인 0 도에서 작은 값을 시작으로 70-80 도 부근에서 최대값을 보인다. 80 도 이상에서는 스퍼터율이 급격히 작아진다. 이는 대부분의 원자가 모재의 벽에서 반사되어 대부분의 이온들이 높은 각도에서 충분한 충돌을 경험하지 못하기 때문이다. 이때 입사 이온에 대해 반사된 이온들의 비를 반사율이라 한다. 반사 이온의 거동은 전방 반사(Forward reflection)와 후방 반사(Backward reflection)로 나뉘어 지고 Fig. 2 에서 보이는 것과 같이 입사 표면의 법선 방향을 기준으로 입사방향으로의 반사를 전방반사 그리고 입사 반대 방향으로의 반사를 후방 반사라 한다. 대부분의 이온들은 전방 반사를 경험하게 되고 이는 Fig. 2 의 SEM 이미지에서 보이는 것과 같이 모재의 바닥 모서리에 이차 스퍼터링을 유발하게 한다. 2 차 스퍼터 되어 탈락한 원자들은 다른 가공 면 위에 증착되어 2 차 재증착 문제를 발생시킨다.

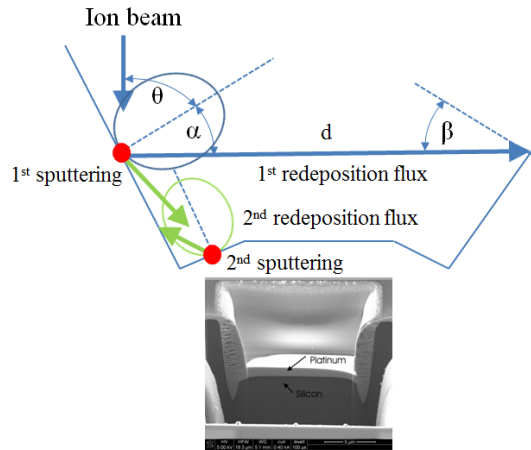


Fig. 2 Schematic illustration of ion beam induced sputter process: it shows primary sputtering and secondary sputtering induced by reflected ions

반사된 이온들의 중요한 특성 중 하나는 입사 에너지를 거의 그대로 가지고 반사된다는 것이다.

집속이온빔에서는 입사된 이온들의 에너지 편차가 작은 특성이 있는 반면 모재 내부에서의 에너지 손실 경험에 따라 반사된 이온들의 에너지가 결정되므로 반사된 이온들의 에너지는 큰 편차를 가지는 특성이 있다.

반사 이온들의 방향 및 에너지 특성을 정확히 계산하는 것이 이차 스퍼터링을 분석하는데 중요하므로 몬테 카를로 해석을 수행하여 반사이온들의 특성을 분석하기로 한다. 또한 스퍼터되는 원자들은 모재와 진공의 계면에서 속도차이로 인해 굴절(Refraction)을 경험하게 되고 최종적으로 탈출 분포가 변화된다. 현재까지 이러한 굴절 현상을 고려한 몬테 카를로 프로그램은 없었으므로 본 연구를 통하여 구현하였다. 다음절에서 몬테 카를로 해석에 대해 설명한다.

2.2 몬테카를로 프로그램

개념적으로 에너지 입자와 고체 모재와의 상호작용을 시뮬레이션 하는 쉽고 좋은 방법은 분자동역학을 7,8 이용하는 방법이다. 이 방법을 이용하면 입사한 이온과 모재 원자들의 거동을 시간적으로 계산할 수 있는 장점은 있으나, 다체(Many-body) 계산을 해야 하므로 많은 계산 시간이 소비된다. 몬테 카를로 방법의 경우 이진충돌(Binary collision) 개념을 이용하여 입사이온 하나를 기준으로 계산하므로 계산이 비교적 단순한데 비하여 이온과 원자의 통계적인 거동만을 계산할 수 있다. 또한 TE(Transport equation)⁸ 을 이용하여 계산하는 방법이 있으나 위에 언급한 두 가지 방법에 비해 정확도가 떨어지는 단점이 있다. Sigmund 는 이 방법을 이용하여 스퍼터링에 대한 해석적인 식을 개발하였다.

본 연구에서는 3 차원 몬테 카를로 시뮬레이션 코드 “iMC”를 개발하였고, 자세한 시뮬레이션 방법에 대해 본 절에서 논의한다.

이체 충돌 개념에서 두 원자의 충돌은 Fig. 3 과 같은 질량 중심(center-of-mass) 좌표계를 사용하며, 두 원자는 반발하는 Coulomb 힘에 의해 서로 산란될 때까지 가까워진다.

두 원자의 접근선 간의 수직 거리를 충돌 파라미터(Impact parameter)라 정의하며, 충돌 중에 두 원자의 길이 r 은 최소거리 r_{min} 이 될 때까지 작아지며 다시 커지게 된다. 충돌 전의 방향과 충돌 후의 방향 간의 각도를 산란각(Scattering angle) θ_c 라 한다. 질량중심 좌표계의 전체 에너지는 식(1)

과 같이 표현된다.

$$E_c = \frac{M_2}{M_1 + M_2} E_1 \tag{1}$$

여기서 M₁ 그리고 M₂ 는 두 원자의 질량을 E₁ 은 충돌 전 입사 입자의 에너지이다. 에너지와 모멘텀 보존을 고려하여 Eckstein⁸ 은 시간에 의존적인 최소 거리 r_{min} 의 식(2)를 구하였다.

$$\frac{V(r_{min})}{E_c} + \frac{p^2}{r_{min}^2} = 1 \tag{2}$$

여기서 V(r)은 두 원자간의 포텐셜을 의미한다. 따라서 최소 거리는 E_c 와 p 에 의존적인 것을 알 수 있다. 최소거리가 위의 식으로 구해질 경우, 산란각 θ_c 는 아래의 식(3)으로 계산할 수 있다.

$$\theta_c(p, E_c) = \pi - 2 \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{pdr}{r^2 \sqrt{1 - \frac{V(r)}{E_c} - \frac{p^2}{r^2}}} \tag{3}$$

여기서 산란각은 충돌 파라미터 p 와 에너지 E_c 에 의존적이라는 것을 알 수 있다. 충돌 중에 에너지 T 는 입사원자로부터 타겟의 원자로 전달되는데, 에너지와 모멘텀의 보존을 고려한 에너지 전달을 아래의 식(4)를 이용하여 계산할 수 있다. 이때 4M₁/M₁+M₂ 를 최대 에너지 전달량, T_m 이라 한다. 최대의 에너지 전달은 이온이 원자와 정면충돌하는 경우, 즉 sin²(θ_c/2) 값이 1 이 되는 조건에서 최대가 된다.

$$T = \frac{4M_1}{M_1 + M_2} E_c \sin^2\left(\frac{\theta_c}{2}\right) \tag{4}$$

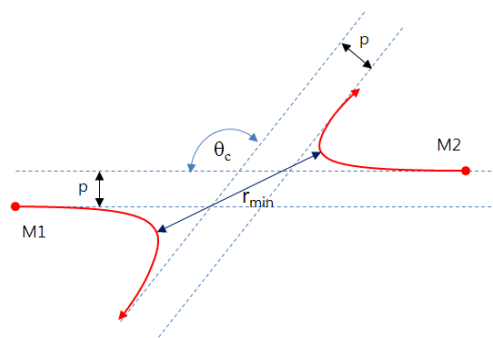


Fig. 3 Collision in center-of-mass coordinates

이러한 계산에서 가장 중요한 변수는 원자간의 상호작용을 가장 잘 기술하는 포텐셜 $V(r)$ 의 설정에 있다. 본 연구에서는 아래의 식(5)의 Screened Coulomb 포텐셜을 그리고 식(6)으로 기술되는 가림 함수(Screening function)를 사용하였다.

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 q^2}{4\pi\epsilon_0 r} \phi(r/a) \quad (5)$$

$$\phi(r/a) = \sum_{i=1}^4 A_i \exp(-B_i \frac{r}{a}) \quad (6)$$

여기서 q 는 기본 전하량, Z_1 과 Z_2 는 두 원자의 원자번호, 상수 ϵ_0 는 진공 유전율($8.854 \times 10^{-12} \text{As/Vm}$), a 는 두 원자의 원자번호에 의존적인 가림 길이를, ϕ 는 가림 함수 그리고 A 와 B 는 피팅(Fitting) 변수를 의미한다.

2.3 몬테카를로 해석

본 연구에서는 윈도우 기반의 3 차원 몬테카를로 프로그램을 개발하였으며, Fig. 4 에 시뮬레이션 결과가 보여지고 있다.

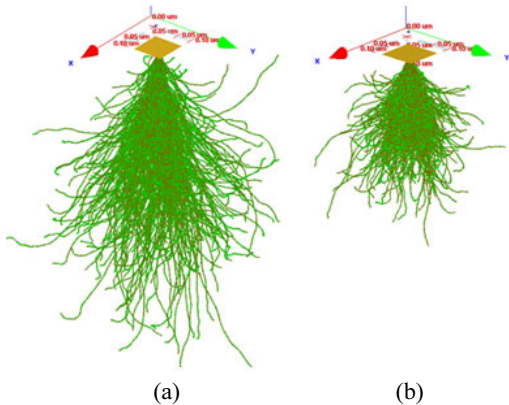


Fig. 4 Graphical results of developed ion beam Monte Carlo simulation program. (a) 30keV and (b) 10keV were used for the simulations

프로그램은 OpenGL 기반의 그래픽 기반 라이브러리를 이용하여 최종결과를 가시화 하였다. 입사각도, 입사에너지, 이온 및 모재의 종류와 같은 초기 입력을 입력하면 스퍼터율과 같은 텍스트 정보와 이온 분포 등의 그래픽 정보를 결과로 볼 수 있다. 입사 이온의 모재내의 분포와 에너지 손실

등의 정보를 볼 수 있으며, 스퍼터 된 원자들의 탈출 코사인 방향각과 에너지를 구할 수 있다.

3. 시뮬레이션 결과

3.1 탈락 원자의 분포

개발된 몬테 카를로 프로그램을 이용하여 이온의 산란, 즉 전방 및 후방 산란에 대한 정보를 입사각도를 변경하면서 계산하였다. 탈락 원자의 경우 입사이온으로부터 에너지를 받아 모재 내부를 진행하다가 탈락하기 때문에 일반적으로 작은 에너지를 가진다. 이로 인하여 탈락 후 가공 중인 모재의 표면에 큰 영향을 미치지 않고 다시 증착되는 특성을 보인다. 이것이 이온빔 가공을 가장 어렵게 하는 탈락 원자의 재증착(Redeposition)이다. 따라서 정밀한 가공을 수행하기 위해서는 탈락 원자의 탈출 방향에 대한 정보를 가능한 정확히 파악하는 것이 중요하다. 일반적으로 스퍼터 된 원자들의 분포는 코사인 분포를 가정하고 이를 정규화(Normalization)하여 시뮬레이션에 사용하며, 2 차원 시뮬레이션의 경우 3 차원으로 정규화 된 분포를 다시 2 차원으로 투영하여 사용한다.^{4,6}

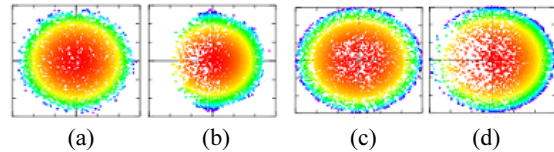


Fig. 5 Top views of simulated sputtered atoms distribution gathered on half sphere. 30keV Ga ion incident into Si substrate. (a) and (c) are normal incident case, (b) and (d) are incident at 70°. The first two((a) and (b)) show the distribution without refraction and (c) and (d) show after the refraction

이미 언급한 바와 같이 탈락 원자는 에너지가 작으므로 탈락 단계에서 모재와 진공의 계면에서 경로를 바꾸는 굴절(Refraction)을 경험하게 된다. 실리콘 모재에 30keV 의 에너지로 입사한 이온에 의해 탈락한 원자들의 분포가 Fig. 5 에 보여지고 있는데, 굴절을 고려한 결과와 고려하지 않은 결과의 차이를 비교할 수 있다. 또한 수직입사보다 일정 각도를 가지고 입사할 경우 반사의 법칙이 적용되어 수직방향을 기준으로 원자들이 탈락하는

것이 아니라 입사 방향에 따라 반사 방향을 달리 하여 한쪽으로 치우쳐서 탈락하는 것을 볼 수 있다.

3.2 이온 반사계수

입사 이온은 입사 각도에 따라 입사 후에 모재 외부로 탈출을 하게 되는데 이것을 입사 이온의 반사(Reflection)라고 하며, 입사 이온에 대한 반사 이온의 비를 식 (7)과 같이 반사계수라 한다.

$$R_N = N_{bs} / N_p \quad (7)$$

이러한 반사 효과로 인하여 스퍼터율은 입사각이 증가할 수록 점진적으로 증가하다가 70-80 도 정도에서 감소하기 시작한다. 반사계수는 이러한 반증으로 입사 각도가 증가 할수록 아주 서서히 증가하다가 70-80 도 정도의 입사 각도에서 급격히 증가하여 90 도에서 최대가 된다. 이러한 반사계수의 경향을 Fig. 6 에서 볼 수 있다.

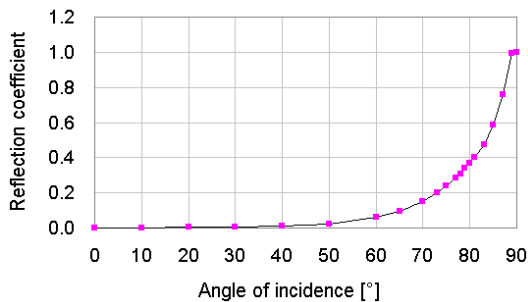


Fig. 6 Reflection coefficients according to the angle of incidence for bombardment of 30keV Ga⁺ on Si substrate

이러한 반사 이온들은 반사 후 모재 외부로 탈출하여 모재의 다른 면으로 향하면 2 차 스퍼터링 발생 시킨다. 이것은 다음절에서 분석하겠지만 대부분의 반사 이온들이 스퍼터링을 유발할 만큼 높은 에너지를 유지하고 있기 때문이다. 이 반사이온들의 2 차 가공 문제는 스퍼터 된 원자들에 의한 재증착 문제와 함께 이온빔을 이용한 가공에서 극복하기 어려운 문제로 인식되고 있다. 따라서 문제를 해결하기 위해서는 반사 이온들의 탈출 방향과 함께 에너지 분포를 가능한 정확히 분석하는 것이 중요하다.

3.3 반사이온의 공간 및 에너지 분포

스퍼터 된 원자들의 특성은 에너지가 작다는 특성이 있으나 반사된 이온들은 높은 에너지를 가지고 모재에 입사하여 작은 에너지만을 모재 내부에서 잃어버리고 모재 외부로 탈출하게 된다. 따라서 반사 이온들은 에너지가 높은 것이 특징이며, 특히 입사 각도에 따라 반사 이온들의 에너지 특성이 달라지는 특성이 있다. 이러한 특성을 개발된 몬테 카를로 프로그램으로 분석하였으며, Fig. 7 에 결과가 보여지고 있다. 입사 각도가 0 도인 수직 입사의 경우 대부분의 입사 이온들은 모재 내부를 더 많이 이동하면서 에너지를 잃어버리고 상대적으로 작은 확률로 외부로 탈출하게 된다. 이에 반해 입사 각도가 증가하면 이온들의 모재 내부에서의 진행 거리는 짧아지고, 이에 비례하여 에너지 손실은 작아지게 된다. 따라서 높은 입사 각도를 가지고 입사한 이온들은 수직 입사한 이온들에 비해 높은 반사계수와 함께 높은 에너지를 가지는 특성이 있다.

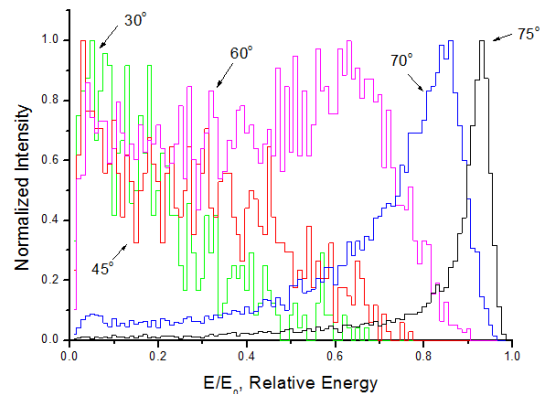


Fig. 7 Calculated energy distributions under various incidence angles. 30keV Ga⁺ ion into Si substrate

반사 이온들의 분포의 경우 탈출 원자들의 분포 보다 입사 각도에 민감하게 변화하게 되는데, Fig. 8 에 보여지는 것과 같이 입사 각도가 증가 할수록 더 강한 방향성을 보인다. 따라서 입사 각도가 증가 할수록 전방산란이 가능하게 일어 난다는 것을 알 수 있다. 특히 탈출 후에 모재의 가공 면 하단 모서리 부위에 추가적인 가공을 유발하여 Fig. 2 의 하단에 보여지는 것과 같은 마이크로 트랜칭(Micro trenching)을 유발하게 된다. 이러한 마

이코로 트랜칭을 정확하게 해석하거나 회피하기 위해서는 반사 이온들의 분포를 포함하여 에너지 분포를 정확히 계산하여야 한다. 같은 방향으로 탈출한 원자라도 동일한 에너지를 가지는 것이 아니므로 마이크로 트랜칭 분석은 신중한 접근이 필요하다고 생각한다.

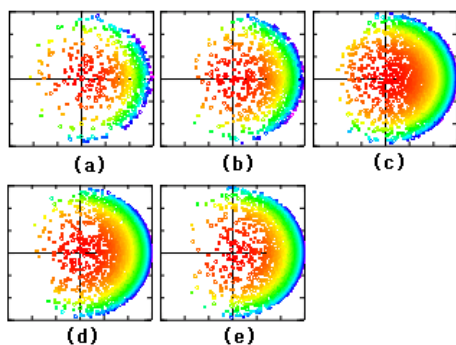


Fig. 8 Top view of backscattered particles distributions under various incidence angles. 30keV Ga+ into Si substrate and incident angles of 30°(a), 45°(b), 60° (c), 70° (d) and 75° (e) were used

몬테 카를로 프로그램은 모재를 비정질 (Amorphous) 재료로 가정하여 시뮬레이션 하므로 몬테 카를로 시뮬레이션을 통해 계산된 스퍼터율 등과 같은 데이터는 추가적인 비정질 현상을 고려할 필요가 없다. 또한 결정성 모재를 시뮬레이션 할 수도 있다. 이때 원자의 결정에 관한 정보를 이용하여 모재 원자 각각에 대한 좌표를 입력하여 시뮬레이션을 수행하게 된다.

4. 결론

이온빔 몬테 카를로 시뮬레이션 코드 “iMC”를 개발하였다. 몬테 카를로 방법은 에너지를 가지고 입사하는 이온의 모재와의 상호작용을 해석하기 위해 사용하는 가장 편리한 시뮬레이션 방법이다. 본 연구에서는 개발된 프로그램을 이용하여 이온의 입사에 대한 모재원자의 탈락과 입사이온의 모재 내부로의 분포를 시뮬레이션 하였다.

입사이온에 의한 모재 원자의 특성은 작은 에너지를 가지고 모재로부터 탈출하는 특성을 보이며 이로 인하여 모재와 진공의 계면에서 굴절 (Refraction)을 경험하였으며, 입사 각도에 따라 탈락원자들의 분포는 큰 차이를 보였다. 이러한 탈

락원자는 이온빔 가공 중의 재증착 문제를 유발한다. 이러한 재증착 문제는 이온과 모재의 종류 그리고 입사 에너지 등과 같은 가공 변수에 따라 높은 정도로 분석이 이루어진다면 문제를 해결하는데 도움이 되리라고 기대한다. 특히 본 연구에서는 탈락원자의 진공 계면에서의 굴절을 시도하였다. 탈출 원자들은 굴절을 경험하여 한 방향으로 치우친 분포가 아닌 고른 분포를 유지하는 경향을 확인하였다.

또한 입사한 이온들은 입사각도가 증가할수록 높은 반사계수를 보였으며, 이는 입사각도가 증가할수록 많은 수의 입사이온들이 반사하기 때문이다. 반사이온들의 특성은 스퍼터 된 원자들보다 높은 에너지 특성을 보였으며, 입사각도가 높아질수록 반사 이온들은 입사할 때의 에너지를 대부분 그대로 유지하며 반사되는 것으로 파악되었다. 이러한 특성은 높은 입사 각도를 가진 가공물의 측면 하단부에 이차 가공을 발생시키게 된다. 이것을 마이크로 트랜칭(Micro trenching)이라 한다. 이는 이온빔을 이용한 정밀 가공에서 탈락 원자에 의한 재증착 문제와 함께 가공을 어렵게 하는 문제이다.

본 연구결과를 이용하면 우선 이온빔을 이용한 정밀한 가공 방법에 대한 연구를 수행할 수 있을 것이라 기대된다. 현재까지 이루어진 대부분의 연구는 첫째, 이온빔의 정확한 직경을 모르는 상태에서 연구가 되었으며, 둘째, 보조가스에 의한 이온빔의 산란과 산란에 의한 빔 직경의 변화 등을 전혀 고려하지 않았고 셋째, 이로 인하여 국부적으로 이온주입 된 영역을 정확히 알지 못하는 상태에서 이루어졌다. 이러한 이온빔 관련 공정변수들을 정확히 파악하지 못하는 상태에서는 정밀한 연구가 이루어지기 어려우므로 본 연구의 결과가 필수적이라 하겠다.

연구 계획으로 이온빔을 이용한 국부 이온주입 (Ion implantation)과 및 에칭 공정을 이용하여 나노단위의 구조물을 정밀하게 생성할 수 있는 연구를 진행 할 계획이다. 이온빔과 보조 가스를 이용한 증착 및 에칭 공정에서 이온빔과 가스의 산란문제, 이온빔의 모재 내부에서의 분포, 이차전자의 발생 등을 고려한 연구가 진행될 예정이다.

참고문헌

1. Ivor, I. and Julius, J. M., “The Physics of

- Micro/Nano-fabrication,” Plenum Press, 1992.
2. Kaesmaier, R. and Loschner, H., “Ion Projection Lithography: Progress of European MEDEA & International Program,” *Microelectron. Eng.*, Vol. 53, No. 1, pp. 37-45, 2000.
 3. Frey, L., Lehrer, C. and Ryssel, H., “Nanoscale Effects in Focused Ion Beam Processing,” *Appl. Phys. A*, Vol. 76, No. 7, pp. 1017-1023, 2003.
 4. Kim, H. B. and Noh, S. L., “The Characteristics of focused ion beam utilized mold fabrication on the micro/nano scale,” *Journal of the Korean Society for Precision Engineering*, Vol. 28, No. 8, pp. 966-974, 2011.
 5. Kim, H. B., Hobler, G., Steiger, A., Lugstein, A. and Bertagnolli, E., “Level set approach for the simulation of focused ion beam processing on the micro/nano scale,” *Nanotechnology*, Vol. 18, No. 26, Paper No. 265307, 2007.
 6. Kim, H. B., Hobler, G., Steiger, A., Lugstein, A. and Bertagnolli, E., “Full three-dimensional simulation of focused ion beam micro/nanofabrication,” *Nanotechnology*, Vol. 18, No. 24, Paper No. 245303, 2007.
 7. Smith, R., “Atom & ion collision in solids and at surfaces,” Cambridge University Press, 1997.
 8. Eckstein, W., “Computer simulation of Ion-Solid Interactions,” Springer-Verlag, 1991.
 9. Matsui, S., “Three-dimensional nanostructure fabrication by focused ion beam chemical vapour deposition,” *Springer Handbook of Nanotechnology*, Part A, pp. 211-229, 2010.
 10. Young, R. J., Cleaver, J. R. A. and Ahmed, H., “Characteristics of gas-assisted focused ion beam etching,” *J. Vac. Sci. Technol. B*, Vol. 11, No. 2, pp. 234-241, 1993.
 11. Vasile, M. J., Xie, J. and Nassar, R. J., “Depth control of focused ion-beam milling a numerical model of the sputtered process,” *J. Vac. Sci. Technol. B*, Vol. 17, No. 6, pp. 3085-3090, 1999.
 12. Tseng, A. A., “Recent Developments in Micromilling using Focused Ion Beam Technology,” *J. Micromech. Microeng.*, Vol. 14, No. 4, pp. R15-R34, 2004.
 13. Patterson, N., Adams, D. P., Hodges, V. C., Vasile, M. J., Michael, J. R. and Kotula, P. G., “Controlled fabrication of nanopores using a direct focused ion beam approach with back face particle detection,” *Nanotechnology*, Vol. 19, No. 23, Paper No. 235304, 2008.
 14. Fu, Y. and Bryan, N., “Fabrication of three-dimensional microstructures by two-dimensional slice by slice approaching via focused ion beam milling,” *J. Vac. Sci. Technol. B*, Vol. 22, No. 4, pp. 1672-1678, 2004.
 15. Orloff, J., “Handbook of Charged Particle Optics,” CRC Press, pp. 129-160, 2009.