3차원 입자 모델을 이용한 마그네트론 스퍼터링 음극의 특성 분석

주정훈*

군산대학교 공과대학 신소재공학과, 플라즈마 소재 응용 센터

Characterization of a Magnetron Sputtering Cathode by a 3D Particle Model

Junghoon Joo*

Department of Materials Science and Engineering and Plasma Materials Research Center,
Kunsan National University, Kunsan 573-701, Korea

(Received October 5, 2008 ; revised October 21, 2008 ; accepted October 30, 2008)

Abstract

A 3D particle code is developed to analyze electron behavior in a planar magnetron sputtering cathode either in balanced or unbalanced configuration. Three types of collisions are included; electron - neutral elastic, excitation to a metastable state and ionization. Flight path is calculated by a 4-th order Runge-Kutta method with a time step of 10 ps. Effects of electron starting position, magnetic field intensity and configuration were analyzed. For a more efficient and accurate modeling, multithreading technique is considered for multi-core CPU computers. Under an assumption of cold ion approach, target erosion profiles are predicted for a flat target surface.

Keywords: plasma, magnetron sputtering, particle simulation

1. 서 론

마그네트론 스퍼터링은 타겟의 크기에 따라서 직선적으로 균일 증착 면적을 키울 수 있는 장점 때문에 반도체 뿐 아니라 LCD, 건축물 유리 코팅, 기계 및 자동차 부품 코팅, 장식용 코팅 등에 널리 사용되고 있다. 가열 증발법에 비하면 타겟의 고순도, 대면적화에 따른 가격 부담이 경쟁력을 제한하는 요소로 작용하고 있다. 특히 타겟 상부에 자기장의 형상에 따른 집중 방전 영역이 발생되고 전체 타겟 부피의 20-30% 정도 밖에 사용하지 못할 뿐 아니라 사각형 타겟이나 원형 타겟 공히 일부분이 먼저 침식되어서 타겟의 사용 수명을 단축시키는 점이 가장 취약한 점으로 지적되고 있다¹⁾. 특히 고출력을 사용하여 높은 생산성을 목표로 하는 경우에는 타겟의 사용효율이 높아야 진공 챔버의 유효 사용 시간을 늘릴 수 있다. 마그네트론에 사용되는 전원

의 종류는 직류, 펄스 직류, 중주파 교류, 고주파 교류 등이 있으며 이를 조합한 경우도 있다. 이들 전원이 갖는 특징을 분석 하기 위해서는 전기장과 자기장 하에서의 전자의 운동을 해석 하여야 한다. 일반적인 스퍼터링시의 가스 압력은 5-20 mTorr 이므로 전자-중성 입자간의 평균 자유 비행 거리가 타겟-기판 거리로 많이 선택되는 50-70 mm 보다는 작지만 낮은 압력에서 플라즈마를 유지하고 높은 이온화율을 유도하기 위해서는 비행 궤적을 길게 하여 전자의 에너지를 충분히 이온화 충돌에 사용할 수 있도록 할 필요가 있다. 자기장의 설계를 통하여 보다 많은 수의 전자들이 넓은 면적에 걸쳐서 높은 밀도의 이온화 충돌을 경험할 수 있도록 하려는 것이 고효율 마그네트론 스퍼터링 음극 설계의 목적이다. Sheridan 등은 실린더형 타겟에 대해서 2차원 모델을 개발하고 타겟 침식 형상을 예측하였다. 집중적으로 침식이 되는 소위 race track의 폭에 대해서 Wendt 등이 수식으로 예측한 바가 있다. 주로 사용되는 방법은 전자와 이온 사이의 정전기

*Corresponding author. E-mail : jhjoo@kunsan.ac.kr

장은 무시하고 타겟에 인가되는 강한 음전기장을 쉬스 모델을 이용하여 고정 값으로 예측한 다음 자기장 해석 결과와 함께 적용하여 전자의 비행 궤적을 구하는 방법이다. 여기에 몇 가지 가장 중요한 충돌 반응을 고려한 것이 위에 언급한 모델링 방법들이다. Nanbu 등은 전기장을 전자와 이온의 움직임을 따라 가면서 풀어낸 결과를 보고하고 있다. 그러나 그 결과는 고정된 쉬스 전기장 모델을 사용한 결과와 크게 다르지 않아서 많은 시간이 소요되는 (100시간 이상, 100 Gflops supercomputer) 바에 비해서 효용이 높지 않다고 판단된다. 타겟의 주변부에 배치되는 양극에 의한 횡방향의 전기장은 음극에 의한 쉬스의 강한 전기장에 비해서 아주 낮은 값을 가질 뿐 아니라 이온화에 필요한 에너지(Ar의 경우 15.8 eV)이하를 갖는 전자들이 주로 그 영향을 받으므로 타겟의 침식 형상을 결정하는 데에는 큰 영향을 미치지 않기 때문에 많은 연구자들이 이러한 현상은 제외하고 연구를 진행해오고 있다. 본 연구에서는 1차적으로 자석 배열과 전자의 발생 위치, 충돌 단면적을 이용한 수치 모사 방법에 대한 자세한 고찰을 통해서 추후 고려하고 있는 펄스 직류 마그네트론 스퍼터링에서의 전자 거동이 직류나 고주파에 비해서 어떤 특성을 가지고 있는지 고찰하는 것을 목표로 한다.

2. 실험 방법 및 수치 모델의 구성

본 연구에 사용한 평판형 마그네트론의 구조는 그림 1에 나타난 바와 같다. 자석의 종류는 Nd-Fe-B이며 여러 개의 사각형 조각 자석을 순철판 요크에 고정시켜서 사용하였다. 타겟의 배면부에는 전기동으로 제작한 backing plate가 있으며 냉각수가 직접 타겟의 뒷면까지 도달 하는 구조로 되어 있다. 3차원 자기장 해석에는 CFD-ACE+를 사용하였다. 그림 1에 나타난 자속 밀도는 타겟과 평행한 반지름 방향($B_r = \sqrt{(B_x^2 + B_y^2)}$)의 값이다. 코너 부분에서의

Fig. 1. Magnet configuration and calculated magnetic fields.

값은 중심에서 반경 방향으로 방향 벡터를 따라가면서 계산한 값을 그레이 스케일로 표시하였다. 단순한 E×B drift에 대한 해는 cycloid나 trochoid이므로 예측이 어렵지 않으나 자속 밀도가 3차원적으로 변화하는 경우에는 전자의 비행 궤적에 대한 예측이 간단하지 않다. 가장 중요한 쉬스의 전기장에 대해서는 Sheridan의 방법을 적용하였다²⁾. 즉, 쉬스의 두께를 가정하고 지수 함수적으로 전위가 변한다는 가정 하에 쉬스를 모델화 하였다. 또한 프리 쉬스도 동일한 논문의 방법을 이용하였다.

전자의 비행 궤적을 계산하면서 충돌에 대한 고려를 해야 한다. 전술한 바와 같이 효율적인 이온화에 가장 큰 영향을 미치는 것은 전자의 위치다. Wendt 등이³⁾ 제시한 자기장과 전기장에 의한 Hamiltonian potential을 그려보면 우물이 형성되는데 그 안에서 어떤 위치에 전자가 진입하느냐가 전자의 추후 비행 궤적을 좌우하게 된다. 자기장 계산 격자는 x, y 방향으로 2 mm 간격, z 방향으로 1 mm 간격을 사용하였다. 계산 시간을 상당히 많이 차지하는 것이 바로 현재의 전자 위치에서 자기장과 전기장 벡터 값을 정확히 산출해 내는 것이다. 이를 간단히 하는 방법으로 본 연구에서는 3차원 자기장 해석 시에 사각형 격자를 사용하였고 이를 그대로 적용하여 현재의 위치를 격자 간격으로 나누면 곧바로 포함된 셀의 지수가 나오도록 하였다. 이와 같은 방법을 사용하면 Pentium IV 3.0 GHz CPU에서 10,000개의 전자를 이용한 비행 궤적 계산에 20 여분 밖에는 소요되지 않는다. 알고리즘에 대한 코딩 작업은 C를 이용하였고 사용자 인터페이스를 위해서 National Instrument사의 LabWindows/CVI를 컴파일러로 사용하였다. 충돌을 포함한 비행 궤적을 계산 후에는 충돌 위치에 대한 정보를 통계 처리하여 탄성 충돌, 준중성 여기 충돌, 이온화 충돌을 나누어 2차원 밀도 분포 그래프로 표현할 수 있도록 하였으며 각각의 충돌에 대한 지역적 통계 처리 그래프도 그릴 수 있도록 하였다. 그림 2에 주 메뉴를 포함하는 첫 화면을 나타내었다. 부 메뉴에서는 읽어 들인 자기장을 여러 가지 면과 위치에서 선 그래프와 2차원 강도 그래프로 표시할 수 있도록 하였다.

계산의 정밀도를 향상시키기 위해서는 전자의 개수를 늘리는 방법, 충돌 여부 결정에 사용되는 난수 발생기의 독립성을 확보하는 방법, 전자의 발생 위치를 통계적으로 밀도 분포로 처리하는 방법 등이 중요하다. 이 중 전자의 개수를 늘리게 되면 직선적으로 계산에 소요되는 시간이 증가한다. 그러나 현재 상용 CPU의 연산 속도는 한계가 있으므로

Fig. 2. Electron trajectories according to their drift velocity.

로 여러 개의 코어를 갖는 CPU 구조에서 높은 효율을 얻기 위해서는 다중 쓰레드 방식의 프로그램을 개발하면 효율적일 수 있다. 즉, 포아송 방정식을 계속 풀어야 하는 self consistent 방식의 계산에서는 쓰레드간의 통신량이 증대하므로 속도 향상을 크게 기대할 수 없으나 본 연구와 같은 전자 비행 궤적 계산에 의한 타겟 이용 효율 향상 목적의 프로그램에서는 미세 그래인화를 통한 효율 향상을 기대할 수 있다. 최근의 수치 계산 연구 동향으로는 그래픽 프로세서의 높은 부동 소수점 계산 능력을 이용한 SIMD(single instruction multiple data)방식의 스트림 프로세서 슈퍼 컴퓨팅이 새로운 저비용 고효율 계산 방식으로 대두 되고 있다. nVidia사의 최근 보고에 따르면 240개의 스트림 프로세서를 장착한 그래픽 수치 해석 보드를 2개 이용하여 1 Tera flops 이상의 연산 속도를 달성할 수 있다고 한다. 조금 속도가 느린 기존의 그래픽 카드를 이용한 분자 동력학 계산의 경우 최고 130배의 속도 증가를 보았다는 보고가 있다⁵⁾.

실제 평판형 마그네트론의 음극은 가로 125 mm, 세로 625 mm의 타겟을 가지고 있으면 주변으로 가스 배분링이 설치되어 있고, 기판은 400 mm의 정 방향으로 챔버 외부에서 스텝 모터로 움직이는 캐리어 위에 얹혀져 있다. 기판과 타겟 사이의 거리는 통상 70 mm로 운영되며 타겟은 2 wt% Al이 혼합된 ZnO이다.

3. 모델링 결과 및 고찰

3.1 충돌이 없는 경우의 전자 비행 궤적 분석

충돌 과정을 고려하지 않은 경우의 전자 비행 궤도 분석을 통해서 어떤 메커니즘으로 마그네트론의

저압 고효율이 달성되는지 관찰하였다. 그림 2에 나타난 것을 보면 drift velocity가 느릴 경우 trochoid가 되고 빠를 경우 cycloid, 더 빠를 경우에는 첨단 부가 없는 둥글둥글한 wiggling 패턴의 비행 궤적을 갖는다. 이는 자기장의 강도와 그대로 비례하여 설명할 수 있다. 즉, 타겟에서 멀어지면 자기장의 강도가 빠른 속도로 감소하는데 타겟 표면에서 발생된 전자가 이 전자기장 포텐셜 우물의 어느 부위에 속해 있느냐가 이 전자의 궤적이 타겟 표면에서 멀어지지 않고 많은 이온화 충돌을 유도해낼 수 있느냐 아니면 몇 번의 충돌로 방전 영역을 벗어나느냐를 결정하게 된다. 그림 3의 전자는 정확히 가장 반경 방향의 자기장이 강한 지역의 y좌표를 시작점으로 하여 생성 시킨 경우이다. 그러나 그림 4와 같이 조금만 시작점의 y좌표를 이동 시켜도 커다란 비행 궤적의 차이를 가져온다. 따라서 이온의 표면 충돌에 의한 이차 전자 발생이 방전 유지의 주 기작으로 가정한다면, 실제 타겟 물질의 2차 전자 발생 계수(γ)의 역수에 해당하는 충돌 횟수 이상의 이온화 충돌을 하나의 전자가 이끌어 내어야 방전이 유지 될 수 있다. W 경우 500 eV에서 γ 가 0.1 정도로 보고되어 있으므로 최소한 하나의 전자가 10번 이상의 이온화 충돌을 유발해야 방전이 유지 될 수 있다⁶⁾.

특히 불안정한 비행 궤적을 보이는 경우가 발견되는데 그림 5에 보인 것과 같이 특정한 위치에서 발생된 전자들의 경우 불안정한 비행 궤적을 나타내고 있다. 모든 조건이 동일하고 다만 발생 장소의 Y 좌표만 10 mm로써 수평 자기장이 약한 곳이다. 비행 궤적 적분 시간 스텝을 줄여도 동일한 결과를 얻는 것으로 미루어 수치 해석 기법 상의 문제는 아닌 것으로 판단된다. 이것이 플라즈마의 혼

Fig. 3. Electron trajectories (trapped indefinitely).

Fig. 4. Electron trajectories started from different y-positions.

Fig. 5. Unstable electron trajectories started at Y=10 mm.

돈 현상과 실질적인 관계가 있는지에 대한 면밀한 고찰이 필요한 것으로 생각된다. 타겟에 아주 가까운 곳에서 전자의 운동을 살펴보면 그림 6과 같은데, 수치 해석적으로는 격자의 크기와 얼마나 정확하게 자기장 및 전기장을 내삽 하면서 비행 궤적을

계산하느냐가 중요하게 작용하는데 본 연구에서 사용한 Z축 방향의 격자 크기는 1 mm이고, 전자의 초기 출발 위치를 0.02 mm 이상으로 해야 정상적으로 cycloid와 trochoid의 궤적이 얻어 졌다. 이는 쉬스의 두께를 2 mm 정도로 보고 방전 전압을 400

Fig. 6. Magnified electron trajectories near at the surface of a target.

V라고 했을 때 균일 전기장을 가정하면 $400 \text{ V}/2 \text{ mm} = 2 \times 10^5 \text{ V/m}$ 가 되고 Z축의 위치를 0이 아닌 0.02 mm 했을 때의 에너지 차이는 $0.02/2 = 0.01$ 이 된다. 즉, 1% 정도의 에너지 차이가 날 수 있는데 이온화 충돌에 필요한 에너지는 15.7 eV 이므로 방전 전압에 해당하는 400 eV 의 1%인 4 eV 는 이온화 충돌 횟수의 계산에는 영향을 주지 않는다.

자기장의 구조를 평행 구조로 해서 전자의 비행 궤적을 구해 보면 그림 7과 같다. 즉, 두 열의 자석에서 나오는 강한 Z축 방향 자기장의 사이를 전자들이 비행하게 된다. 중요한 특징은 타겟의 표면에 평행한 자기장 성분이 거의 없으므로 전자들의 비행 궤적이 크게 늘어나지 않는다는 것이다. 대신 기관 쪽으로 많은 수의 전자들이 방출되므로 플라

즈마 밀도는 낮고 영역은 기관 쪽으로 확장된 상태의 마그네트론 방전 형상이 얻어 질 것이다.

3.2 전자-중성 입자간 충돌각 분포

전자와 중성 입자가 충돌 했을 때 전자의 충돌각은 문헌에 나와 있는 Nahar 등의 탄성 충돌 데이터를 이용하였다⁷⁾. 난수를 발생시킬 때 이와 같은 특정한 분포를 갖도록 하는 방법에는 rejection method, 함수를 이용한 방법 등이 있다. 본 연구에서 사용해야 하는 분포 함수는 닫힌 형태의 함수가 아니고 수치적으로 주어지는 이산값이다. 따라서 보다 효율적으로 분포 함수를 빠르게 만들어 내기 위해서 다음과 같은 방법을 사용하였다. 일정한 크기의 산란각 집합을 정수 배열로 정의하고 미분 산란각 단

Fig. 7. Electron trajectories: parallel magnet configuration.

Fig. 8. Scattering angle distribution for 5,000 electrons traced.

면적을 기준값에 대한 비율로 정수가 되도록 한 다음 위의 집합에 그 단면적에 해당하는 횟수만큼 반복해서 원소로 만든다. 모든 산란각에 대해서 이와 같은 스텝을 반복하고 산란각을 샘플링 할 때에는 난수를 만들어서 선정한다. 2차 산란각(충돌 전 진행 방향에 대해서 원주 방향의 각)은 0에서 360도 사이의 난수를 만들어 사용하였다. 이 두 가지 경우에 대해서 5000개의 전자에 대한 비행 궤적을 시뮬레이션 한 결과의 산란각 통계를 그림 8에 나타내었다. Nahar의 논문에 나와 있는 표 값을 이용한 몬테칼로 계산 결과와 분포함수 그래프는 잘 일치하여서 본 연구에서 사용한 방법이 rejection 방법에 비해서 손실 스텝이 없는 빠른 속도를 갖고 있음을 보였다. 많은 수의 전자를 이용하여 계산하는 것은 전체적인 통계 오차를 줄일 수 있으나 편향된 결과를 예방하지는 못한다. 오히려 전자의 발생 초기 위치의 선정, 충돌 산란각의 설정 등이 더 큰 영향을 미친다. 그림 8에서 보는 것과 같이 마그네트론에서 전자의 비행 거리를 늘려서 높은 이온화율을 얻어 낼 수 있는 기초적인 원인이 작은 산란각에 있음을 알 수 있다. 전 항의 충돌이 없을 때의 비행 궤적 계산에서 전자의 출발 Y위치에 따른 차이를 보면 충돌이 없으면 무한히 간혀 있는 궤적을 보이는 위치들이 타겟에 수평한 방향의 자기장

Fig. 9. Integrated scattering cross sections for elastic, excitation, and ionization.

이 강한 지역이다. 따라서 가장 오랫동안 전자를 가속-이온화충돌-가속의 순환을 거치면서 사용하려면 충돌시의 산란각이 작을수록 유리하다. 그림 8의 데이터처럼 대부분의 충돌이 60도 미만의 작은 각 산란으로 이루어져 있는 점이 전자-알곤의 충돌에서 전자를 여러 번 효율적으로 사용할 수 있는 근거가 된다.

3.3 탄성 충돌, 준안정 중성 여기 충돌, 이온화 충돌

전자와 알곤의 충돌 중 주로 낮은 에너지 전달을 갖는 탄성 충돌은 주로 이온화나 준안정 중성 여기 충돌에 필요한 에너지 보다 낮은 운동 에너지를 갖는 상태에서 주로 일어난다. 이들 세 가지의 충돌에 대한 단면적을 구해보면(그림 9) 전자의 에너지에 따라서 준안정 여기상태 충돌과 이온화 충돌은 우선순위가 바뀔 수 있다. 즉, 전자의 에너지가 26.5 eV 이하에서는 준안정 여기 충돌이 우세하고 그 이상에서는 이온화 충돌이 우세함을 알 수 있다. 시뮬레이션에서 사용한 전자의 개수는 10,000개 정도인데 초기 발생 위치의 Z좌표는 위에서 서술한 바와 같이 0.02 mm로 하였다. 여기서 전기장에 의한 가속이 전자의 에너지를 증가시키며 계산에 이용한 시간 간격을 지난 다음(현재는 10 ps)에는 난수를 발생시켜서 충돌 확률과 비교하여 충돌 여부를 결정하고 다시 2차 난수를 발생시켜서 충돌의 종류를 결정한다. 일반적으로 알곤 방전을 전산 모사하는데에는 7가지 정도의 반응(탄성 충돌, 준안정 중성 여기, 이온화, 기타 전자 준위 간 천이)을 고려해야 하는데 이온화에 의한 타겟의 침식만을 보기 위한 목적이라면 상기 3개의 반응만을 고려하는 것도 타당하다. 1차 난수를 이용하여 충돌 여부를 판단하는 데에는 3개 반응의 적분 충돌 단면적을 더해서

$$\lambda = \frac{1}{n \cdot \sigma} = \frac{1}{n \cdot (\sigma_{elast} + \sigma_{exc} + \sigma_{ion})} \quad (1)$$

λ = mean free path (m)

n = particle density (#/m³)

σ = collision cross section (m²)

식 (1)과 같은 방법으로 평균 자유 행로를 구한 다음 난수를 이용해서 결정한다고 보고하고 있다.²⁾ 이 단계가 전체적인 전산 모사 스텝에서 가장 중요한 부분의 하나이다. 문헌에서 검증가능한 자세한 방법을 보고 하지 않고 있으나 난수의 독립성 문제를 제외하고라도 이미 충돌 없이 비행한 거리에 대한 고려 여부에 대한 문제가 남는다. 즉, 충돌이 보다 많이 일어나는 방향으로 유도가 되면 마그네트론의 특성 중 적은 전방향 산란각에 의한 비행 궤적 포획 효과가 감소하고 방전 영역을 벗어나기까지 총 이온화 충돌의 횟수가 인위적으로 감소할 우려가 있다. 즉, 세 가지에 대해서 평균 충돌 횟수를 구해보면 그림 10과 같다. 이온화 충돌 횟수의 평균이 8정도 나오고 최빈치는 12정도이다. 이 때의 모사 조건은 400 V의 방전 전압, 알곤 압력 5 mTorr, 쉬스 두께 2 mm이다. Sheridan등이²⁾ 보고한 바에 의하면 실린더형의 마그네트론 타겟에서 평균 이온화 충돌 14.26, 최빈치 20이다. 이온화 충돌의 분포 함수 모양도 다른데 본 연구에서는 쌍봉형(bimodal)을 그리고 있으나 Sheridan 등의 모델에서는 최빈치를 중심으로 하는 단봉형을 나타내고 있다. 즉, 이온화 충돌 횟수가 작은 전자들의 확률이 본 연구보다 낮다. 이 원인에 대해서 다음의 가정을 할 수 있다. 첫째, 새로운 전자의 출발 위치에 대한 편향 선택 여부다. 실제로 새로운 전자는 이온의 타겟 표면 충돌에 의해서 이차 전자로 발생된다. 즉, 타겟 전 영역에서 출발하는 것으로 난수 2개를 발생시켜

서(x, y) 좌표를 주는 방법을 사용하게 되면 충돌 횟수가 낮은 전자들이 전체의 통계에서 차지하는 비율이 증가하게 된다. 여기에 초기 전자의 발생 위치 좌표를 기존의 전자가 이온화 충돌을 일으킨 지역의 비중을 높여서 전산 모사를 하는 방법을 사용할 수 있다. Sheridan 등이 사용한 방법도 이와 같다고 문헌에 보고하고 있는데 이 방법이 갖는 임의성이 전체적인 모사의 통계를 편향시킬 수 있다. Sheridan 등의 모사 결과에서는 400 eV의 에너지를 모두 갖는 전자가 한 번의 이온화 충돌에 15.8 eV씩 소모한다면 최대 25회 이온화 충돌이 가능하다. 본 연구의 결과를 보면 그림 10에 보인 바와 같이 평균 9회의 이온화 충돌을 하며 최대 16회의 충돌을 한다. 여기에 준안정 중성 상태로의 여기와 타성 충돌에 의한 에너지 전달을 고려하면 최대 도달 에너지를 구할 수 있다. 그림 11에서와 같이 평균 2회의 준안정 중성 상태 여기 충돌을 하므로 11.6 eV씩 에너지를 잃어버리므로 23.2 eV를 9회의 이온화 충돌에 의한 에너지 손실량 142.2 eV를 더하면 165.4 eV가 된다. 인가전압이 400 V이므로 40%에 해당하는 값이 된다. 이 결과에 대해서 Sheridan 등이 보고한 값과 비교를 하면 큰 차이가 나는데 그 원인은 다음과 같이 예상할 수 있다. 첫 째는 Sheridan 등이 계산한 충돌 확률 분포가 본 연구보다 낮게 설정 되었을 가능성이 있다. 즉, 평균 자유 비행 거리가 길게 설정되어서 충돌 없이 비행 하는 시간이 길어지게 되면 쉬스의 전기장에 의한 가속으로 평균 에너지가 증가하게 되고 따라서 총 이온화, 준안정 중성 입자로의 여기 확률도 증가하게 된다. 결과적으로 이온화 충돌의 총 횟수가 증가한 것으로 나오게 될 것이다. 두 번째는 전술한 바와 같이 이온 충돌로 발생하는 전자의 초기 위치에 대한 임의적 편향성 설정이다. Fan¹⁾ 등의 결과에서도 이온화 충돌 위치를 나타낸 그래프를 보면 식각 트랙 이외의 위치에서는 거의 이온화 충돌이 일어나지 않은 것으로 보고하고 있다. 본 연구에서 나타난 이온화

Collision statistics

Fig. 10. Collision statistics for ionization.

Collision distribution(Z)

Fig. 11. Z-position statistics for ionization collisions.

충돌의 Z방향에 따른 분포를 그림 11에서 보면 최빈값은 약 2 mm이며 평균값은 5.5 mm다. 즉, 쉬스의 두께 설정값과 프리쉬스 사이에서 거의 모든 이온화 충돌이 발생하고 있다는 결론이다. 그림 4에서 보인 바와 같이 전자의 발생 위치가 $Y=40$ mm인 평행 자기장의 최고점에서 10 mm만 벗어나면 타겟에서 $Z=40$ mm까지 비행 궤적이 증가한다. 즉, 유효 이온화 충돌은 이 경우 대개 타겟의 표면에 접근한 침식 폭의 가장 자리에서 발생한다는 것을 알 수 있다.

Sheridan이 기술한 바에 의하면 이전의 전자가 이온화 충돌을 일으킨 위치를 기록하고 이것을 가중치로 삼아서 다음의 전자를 출발시킬 때 적용하며 이 효과는 계산에 소요되는 시간을 줄여준다는 설명을 하고 있는데 전 타겟 영역에서 균일하게 무작위 샘플링을 하는 경우에는 이들과 같은 이온화 충돌 횟수 통계 결과가 나오지 않는다. 대개의 마그네트론 모델링 논문의 경우 타겟의 침식 깊이 분포와 비교한 데이터를 통해서 전 과정을 합리화하는 경향이 있다. 그러나 타겟의 침식 깊이 분포의 상대적 비교는 단순히 자기장 해석을 통해서 얻은 즉, 타겟에 수평한 방향의 자기장의 값이 최대값을 보이는 위치와 정확히 일치하고 침식 폭에 대해서는 Wendt 등이³⁾ 해밀토니안 포텐셜 에너지 전개를 통해서도 상당히 정확하게 예측한 바 있으므로 문

테칼로 모사가 갖는 장점을 정확히 나타내고 있다고 할 수 없다.

그림 12에는 충돌이 없는 경우 전자의 출발 위치를 난수를 이용하여 100개를 추적, 기록했을 때의 모습을 보여주고 있다. 많은 논문들이 충돌이 없을 때의 비행 궤적은 보여 주고 있으나 충돌이 있을 때의 비행 궤적은 보여 주지 않고 있다. 본 연구에서 나타난 충돌을 고려했을 때의 비행 궤적은 예상보다 훨씬 혼돈적이며 자기장이 전자를 구속해서 높은 전자 사용 효율을 갖는다는 일반적인 생각에 훨씬 못 미치는 양상을 직관적으로 보여준다(그림 13). Sheridan 등의 결과에서 평균 이온화 충돌이 400 eV의 전자들에 대해서 14번이라고 하면 본 연구의 결과보다 최대 50% 정도 연장된 비행 궤적을 가질 것으로 예측할 수 있다. 그렇다고 해도 현재의 비행 궤적 보다 크게 늘어난 자유 비행 궤적에 근접한 값을 갖기는 어려울 것으로 보인다. 그림 14에는 실제로 스퍼터링에 사용한 AZO 타겟의 사진을 나타내었는데 그림 12와 13의 중첩된 형상을 하고 있다.

3.4 음전압 펄스 시에 발생하는 고에너지 전자의 거동

그림 6, 7에 보인 바와 같이 모델링 결과에서 보면 9 eV에 이르는 고에너지의 전자가 음전위의 펄

Fig. 12. Electron flight paths without collisions.

Fig. 13. Electron flight paths with collisions included.

Fig. 14. Erosion pattern of Al:ZnO target.

스 부분에서 발생한다. 이들에 의한 박막의 특성에 대한 연구는 O'Brien 등이⁹⁾ 알루미늄 산화막의 반응성 증착에 대해서 하고 있는데 dual cathode 방식의 마그네트론에서 각기 위상이 180도 차이 나는 펄스 전압을 옆의 음극에 인가해서 치밀한 박막 구조를 얻었다. 또한 직접 Langmuir probe를 이용한 측정에서 Bradley 등은¹⁰⁾ 최고 20 eV가 넘는 고에너지의 전자를 측정하였다고 보고하고 있다. 실제로 기관 전류를 측정한 결과에서 펄스 주파수에 따라서 플라즈마 영역의 부동 전위가 직류의 경우보다 증가하고 기관이 접지 전위를 유지하고 있는 구조에서는 이에 의한 영향으로 펄스 스퍼터링에서 성장하는 박막의 표면에 더 많은 이온 충돌 에너지를 얻게 된다는 추론이다. 이를 수치 모델에서 재현하려면 전자 궤적 모델링만이 아닌 3차원 PIC-MCC 코드를 사용하여야 한다. 그러나 여기에서도 어려운 점은 250 kHz의 주기가 4 μ s이고 음전위 펄스의 상승 시간이 최대 10 ns이므로 상당히 긴 시간 동안 전자의 궤적을 추적하여야 한다는 것이다. 이를 실제적으로 이용할 수 있는 수준의 연산 능력을 가지려면 다중 CPU 병렬 연산 구조가 필수적이다. 앞으로 상용 3차원 PIC-MCC 코드인 TechX사의 VORPAL을 이용해서 시도할 예정이다.

4. 결 론

전자의 탄성 충돌, 준안정 여기 상태 충돌, 이온화 충돌을 고려한 3차원 사각형 정자장 마그네트론 음극의 특성을 분석하기 위하여 자기장 해석과 함께 전자의 거동을 수치 모델화 하였다. 전자는 발생 위치에 따라서 궤적에 큰 차이를 보였으며 이는 전기장과 자기장이 결합된 드리프트 운동에서 전자 생성 위치에 따른 자속 밀도의 차이에 기인하며 개발된 코드는 기존의 연구자들이 보고한 바와 유사한 결과를 보였다. 충돌 단면적을 이용한 전자 궤적 추적 코드 부분에서 일반적인 난수 생성-판단-거부 알고리즘 보다 연산 효율을 개선할 필요가 있

었으며 미리 계산한 결과를 회전식 찾아보기 표(permutational look-up table) 형식으로 만들어 사용하였다. 전자는 타겟 상부 3 mm 이내에서 거의 모든 이온화 충돌을 하는 것으로 나타났으며 -400 V의 전압이 걸린 타겟에서 12번의 이온화 충돌을 하는 경우가 가장 빈도가 높았다. 중성 입자와 충돌이 없는 자유 비행의 경우와 세 가지 충돌을 고려한 경우의 합은 실제 타겟의 침식 형상과 잘 일치하였다.

후 기

본 연구는 2007년도 중소기업기술혁신 과제의 연구비 지원으로 이루어졌습니다.

참고문헌

1. Q. Fan, L. Zhou and J. Gracio, J. Phys. D: Appl. Phys. 36 (2003) 244
2. T. E. Sheridan, M. J. Goekner, and J. Goree, J. Vac. Sci. Technol A8 (1990) 30
3. A. Wendt, M. A. Lieberman, and H. Meuth, J. Vac. Sci. Technol A6 (1988) 1827
4. S. Kondo and K. Nanbu, J. Phys. D: Appl. Phys. 32 (1999) 1142
5. J. Phillips, Seminar materials, "High performance computing with CUDA: Molecular Dynamics", University of Illinois at Urbana-Champaign, 2007
6. S. Brown, "Basic data of plasma physics", American Vacuum Society AIP press, New York (1994) 230
7. S. N. Nahar and J. M. Wadehra, Phys. Rev A 35 (1987) 2051
8. M. H. Kalos, P. A. Whitlock, "Monte Carlo Methods Volume I: Basics", John Wiley & Sons, New York (1986) 61
9. J. O'Brien, P.J. Kelly, Surf. Coat. Technol. 142-144 (2001) 621
10. J. W. Bradley, H. Backer, P. J. Kelly, R. D. Arnell, Surf. Coat. Technol 135 (2001) 221