

## 이온화 클러스터 빔 증착의 박막 형성 기구에 관한 연구

신 치 범 · 이 경 호 · 황 경 순\* · 문 상 흡\* · 조 원 일\*\* · 윤 경 석\*\*

아주대학교 화학공학과, \*서울대학교 화학공학과, \*\*한국과학기술연구원 화공연구부  
(1996년 1월 16일 접수, 1996년 5월 6일 채택)

### A Study on the Film-Formation Mechanism by Ionized Cluster Beam Deposition

C. B. Shin, K. H. Lee, G. S. Hwang\*, S. H. Moon\*, W. I. Cho\*\*, and K. S. Yun\*\*

Dept. of Chem. Eng., Ajou Univ., Suwon 442-749, Korea

\*Dept. of Chem. Eng., Seoul Nat'l Univ., Seoul 151-742, Korea

\*\*Div. of Chem. Eng., KIST, Seoul 136-791, Korea

(Received January 16, 1996, Accepted May 6, 1996)

**요 약 :** 이온화 클러스터 빔 증착에 의한 박막 형성 기구를 연구하였다. 가속전압, 기판온도, 표면이동 활성화에너지, 임계핵 크기 등이 박막의 결정입자크기 및 표면 평활도에 미치는 영향을 조사하기 위하여 Monte-Carlo방법에 근거한 전산 모사 프로그램을 개발하였다. 클러스터의 운동에너지가 박막형성에 미치는 영향을 관찰함으로써 높은 가속전압이 입자들의 표면이동 에너지를 증가시키며 단결정막의 생성을 용이하게 함을 알 수 있었다. 기판온도가 증가함에 따라 입자의 운동에너지 소산(dissipation)속도는 느려지고 따라서 결정입자의 크기가 커졌다. 이러한 효과는 임계핵 크기가 클수록 두드러졌다. 표면이동 활성화에너지는 입자와 기판간의 상호작용력과 운동에너지 소산속도에 영향을 미침이 발견되었다. 가속전압, 기판온도, 표면이동 활성화에너지는 박막의 평활도에 복합적인 영향을 미치는 것을 알 수 있었다.

**Abstract:** The mechanism of thin-film formation by Ionized Cluster Beam Deposition(ICBD) was investigated. A simulation program based on the Monte-Carlo method was developed in order to investigate the effects of the acceleration voltage, substrate temperature, activation energy for the surface migration, and critical nuclei size on grain size and surface roughness. Studies of the effect of kinetic energy of clusters on the film formation processes revealed that high acceleration voltage enhanced the surface-migration of adatoms and made it easier for an epitaxial film to be formed. The relaxation time of kinetic energy of adatoms increased with the substrate temperature, which in turn increased the grain size of the crystalline film. This effect was more clearly distinguished when the critical nuclei size was large. The surface-migration activation energy was found to affect the interaction between the adatoms and the substrate and thus the relaxation time of kinetic energy. Investigations of the surface roughness revealed that the acceleration voltage, the substrate temperature, and the surface-migration activation energy exerted a collective effect on the morphology of the film surface.

#### 1. 서 론

이온화 클러스터 빔 증착 (ionized cluster beam deposition; ICBD)은 이온화된 클러스터를 이용하여

낮은 기판온도하에서 금속, 반도체, 절연물질 및 유기물질 등의 고품위 박막을 얻을 수 있는 새로운 기법이다[1].

Fig. 1은 전형적인 ICBD장치의 개략도이다. 고온

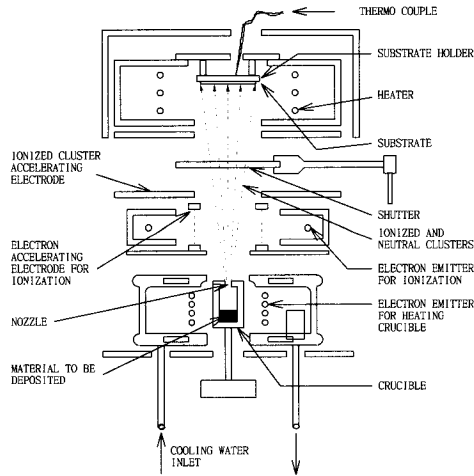


Fig. 1. A typical ICBF system.

의 crucible내에서 형성된 증착물질의 증기는 미세한 노즐을 통하여 진공영역으로 분사된다. 이때 과냉각 현상에 의하여 수백에서 수천 개의 원자가 응집된 클러스터가 형성된다. 이 클러스터를 전자의 충돌에 의하여 이온화시키고 고전압이 걸린 전기장을 통과시킴으로써 가속한다. 위에 열거한 과정 중에서 노즐로부터 분사된 클러스터의 운동에너지, 클러스터의 이온화율, 이온화된 클러스터의 가속전압 및 가속전극의 배치 등을 적절히 조절함으로써 기판에 입사되는 클러스터의 원자당 평균 에너지를 자유롭게 선택할 수 있다. 증착되는 박막의 특성은 클러스터의 구조, 이온화율 및 입사에너지 등과 밀접한 관련이 있기 때문에 ICBF기법은 기존의 물리증착법(physical vapor deposition)이나 화학증착법(chemical vapor deposition)과는 달리 박막의 물성 조절이 용이하여 우수한 특성의 박막을 얻을 수 있음이 실험적으로 입증되었다[2, 3, 4].

또한 ICBF기법은 VLSI나 USLI공정에 이용할 경우 낮은 기판온도하에서 단결정 박막을 성장시킬 수 있기 때문에 autodoping이나 solid state diffusion 등을 방지할 수 있으며 박막의 결정성, 결함도, adhesion 및 step coverage 등이 우수하여 집적회로 제조공정의 불량율을 현저히 감소시킬 수 있을 것으로 기대되고 있다. 이러한 연유에서 현재 일본, 미국 등지에서 많은 연구가 진행되고 있다. 그러나 이러한 연구는 대부분 실험에 편중되어 ICBF의 증착조건과 증착된 박막의 특성과의 관계가 정성적인 설명에 그

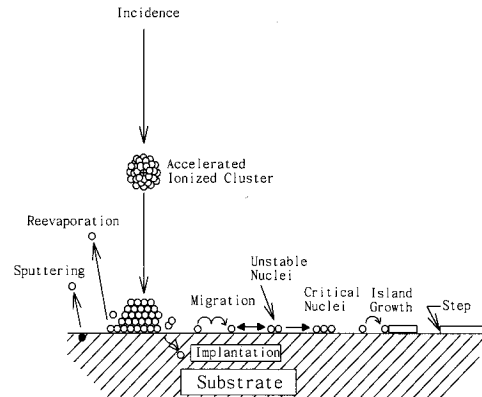


Fig. 2. Schematic diagram of the thin-film formation process.

치고 있다[5].

따라서 ICBF가 박막의 특성향상에 미치는 정확한 원인을 알아보기 위하여 실험을 통한 연구와 더불어 전산모사에 의한 이론적 연구가 요구되고 있다. Averbach와 Hsieh는 molecular dynamics 방법을 사용하여 클러스터와 기판의 물질 및 클러스터의 운동에너지에 따른 기판의 손상정도와 클러스터가 붕괴되어 증착되는 모습을 살펴보았다[6]. 또한 이들은 Lennard-Jones interatomic potential을 사용하여 기판의 입자 및 클러스터 입자의 크기에 따라 달라지는 성장된 막의 표면평활도를 알아 보고, 이를 MBE(molecular beam epitaxy)공정에 대한 전산모사 결과와 비교해 보았다[7]. 이외에 Muler[8]는 Lennard-Jones interatomic potential을 사용하여 6각형의 클러스터들이 증착될 때의 모습을 클러스터의 운동에너지로 바꿔 가면서 알아 보았다.

그런데 기존의 전산모사 연구에서는 막의 특성변화에 미치는 기판온도의 영향에 관해서는 살펴보지 않고 있다. 하지만 실험 결과에 의하면 기판의 온도가 박막의 성질에 많은 영향을 미친다는 사실을 알 수 있다[9]. 따라서 본 연구에서는 클러스터의 입사에 따른 클러스터 입자의 붕괴, 표면확산, 흡착, 핵형성, 박막형성 등의 현상을 포함하는 새로운 모델을 정립하고 이 모델에 근거하여 클러스터의 입사에너지와 기판의 온도 등이 박막형성에 미치는 영향을 이론적으로 해석하고자 한다.

## 2. 모 델

Fig. 2는 ICBD에 의한 박막형성과정을 개념적으로 나타낸 것이다. 이온화된 클러스터는 기판이 있는 방향으로 가속된다. 클러스터의 입자들은 Van der Waals 인력에 의하여 약하게 결합되어 있기 때문에 클러스터가 기판과 충돌하면 쉽게 입자로 갈라진다. 클러스터를 구성하고 있던 입자들 중 일부는 탈착하여 기상으로 방출(reevaporation)되고, 일부는 기판에 주입(implantation)되기도 하며, 기판을 이루고 있는 입자에 높은 운동에너지를 전달하여 기판으로부터 방출(sputtering)되도록 하기도 한다. 나머지 입자들은 증대된 표면확산 에너지를 가지고 기판표면을 이동하게 된다[2]. 이때 입자들은 다른 입자들을 만나 핵을 형성하거나 이미 형성된 핵 또는 island의 step site에 붙어 성장하게 된다. 임계크기보다 작은 핵의 입자들은 다시 흩어져서 표면이동을 할 수도 있으며, 임계크기 이상의 핵은 성장을 계속하여 island를 이루고 증착이 계속되면 연속적인 박막을 형성한다. 본 모델에서는 각 입자가 입사할 때 지닌 높은 운동에너지를 소산하는 과정을 설명하고 소산하는 에너지양을 계산하기 위하여 다음에 열거한 일련의 식들을 유도하였다.

클러스터의 입자간 결합에너지를 극복하여 입자들이 분리하는데 필요한 에너지와 클러스터와 기판간의 충돌에 의하여 기판으로 전이되는 운동에너지의 크기가 무시할 만하고, 클러스터를 형성하고 있는 입자들이 같은 양의 에너지를 가지고 기판위를 이동한다고 가정하면 각 입자의 초기 이동속도  $\langle v_N \rangle_0$ 는 다음과 같다.

$$\langle v_N \rangle_0 = \sqrt{\frac{2E_i}{Nm}} \quad (1)$$

여기서  $E_i$ 는 클러스터의 초기 운동에너지,  $N$ 은 클러스터를 이루는 입자의 수,  $m$ 은 입자의 질량을 나타낸다.

높은 운동에너지를 가진 각 입자는 기판과의 마찰에 의하여 에너지를 소산하게 되는데, 이 때 입자의 속도변화를 다음의 관계식으로 설명하고자 하였다.

$$m \frac{d\langle v_N \rangle}{dt} = -\zeta \langle v_N \rangle \quad (2)$$

단,  $t$ 는 시간,  $\zeta$ 는 마찰계수이며, 이 식을 적분하면

$$\langle v_N \rangle = \langle v_N \rangle_0 \exp\left(-\frac{\zeta}{m}t\right) \quad (3)$$

마찰계수( $\zeta$ )는 기판의 온도 및 입자와 기판과의 상호작용력의 함수로 추정되는데, 이에 대한 관계식을 얻기 위하여 Langevin 방정식을 적분하여 얻은 입자의 평균이동거리를 이용하였다[10].

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2kT_s}{\zeta} \left\{ t - \frac{m}{\zeta} (1 - e^{-\frac{\zeta}{m}t}) \right\} \quad (4)$$

여기서  $T_s$ 는 기판의 온도를 나타내며,  $t \gg m/\zeta$ 이면 입자는 입사될 때의 운동에너지를 모두 소산하고, 단지 기판으로부터 받는 열에너지에 의하여 표면이동을 하게 된다. 이때 입자는 Random walking model[11]에 의하여 움직이게 되므로 다음의 관계식을 얻을 수 있다.

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2kT_s}{\zeta} t = 2Dt \quad (5)$$

여기서  $D$ 는 표면확산계수이고, 아래와 같이 표시된다[12].

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E_m}{kT_s}\right) \quad (6)$$

$$D_0 = \lambda^2 \nu$$

$$\nu = \frac{kT_s}{h}$$

여기서  $\lambda$ 는 Hopping Distance,  $\nu$ 는 hopping frequency,  $E_m$ 은 표면이동 활성화 에너지를 나타낸다. 이로부터  $\zeta$ 와  $E_m$ 의 관계식을 얻을 수 있다.

$$\zeta = \frac{h}{\lambda^2} \exp(E_m/kT_s) \quad (7)$$

즉, 마찰계수( $\zeta$ )는 기판과 입자간의 상호작용력에 의하여 결정되는  $E_m$ 과 기판온도의 함수가 된다. 즉, 기판의 온도에 의하여 마찰계수가 변한다. 이로부터 기판의 온도가 에너지 소산에 많은 영향을 주고 있음을 알 수 있다. 단, 본 모델에서는 island간의 coalescence, 입자의 탈착 및 기판의 불순물(impurity)의 영향 등은 고려되지 않았다.

## 3. 전산모사

본 연구에서는 입자의 거동을 난수(random num-

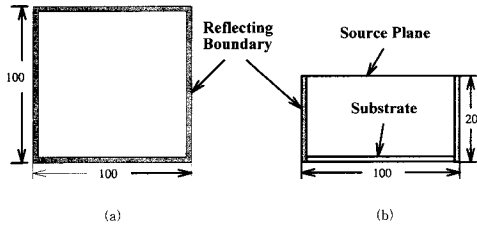


Fig. 3. Schematic diagram of the problem domain.  
(a) Top View, (b) Side View.

ber)에 의하여 확률의 함수로 해석하는 Monte Carlo 방법을 채택하였다. 본 연구에 사용한 계산 영역은  $100 \times 100 \times 20$ 의 크기를 가지는 3차원 공간으로서, Fig. 3은 그 개략도이다.

새로운 클러스터가 생성되는 위치는 source plane에서 난수를 발생시켜 결정한다. 이 때 얻어진 좌표를 박막이 형성될 기관의 표면까지 수직 이동시켜 입사되는 클러스터와 박막이 만나는 위치를 구한다.

클러스터가 박막과 충돌하면 클러스터는 붕괴되고, 클러스터를 구성하고 있는 각 입자는 표면이동을 하게 되는데 본 연구에서는 입자들의 표면이동이 다음의 두 단계를 거쳐 일어나는 것으로 설정하였다. 즉, 입사시의 높은 에너지를 지닌 입자들은 주위에 존재하는 입자들이나 step site에 큰 영향을 받지 않으므로, 방향성이 없는 random walking에 의하여 이동한다. 이동방향은 난수를 발생하여 결정한다. 이 단계는 입자의 속도가 기관의 열에너지만으로 움직이는 속도 이상일 때 일어나며, 이 때의 총 hopping횟수를  $N_h$ 라고 한다.

다음 단계로 입자들이 어느 정도 에너지를 잃어버려 기관으로부터 받는 열에너지만으로 움직이는 속도가 이하일 때는 인접한 다른 입자들이나 step site의 인력에 의하여 방향성을 가지고 이동을 한다. 이 때 표면이동방향에 대한 확률은 각 방향의 표면이동 활성화 에너지에 의하여 결정되며, 이 단계에서의 총 hopping횟수를  $N_h$ 라 한다.

핵 형성은 입자들이 방향성을 가지고 이동하는 단계에서 일어난다. 즉,  $N_h$ 번 hopping하는 동안 다른 입자들을 만나게 되면 핵을 형성한다. 핵을 형성하고 있는 입자의 수가 임계핵 크기  $n^*$ 보다 작으면 불안정하여 다시 분리되기도 한다. 입자의 수가  $n^*$ 이상이 되어 안정한 핵은 island로 처리하여 성장시킨다. Island의 성장은 핵형성의 경우와 마찬가지로 열에너지

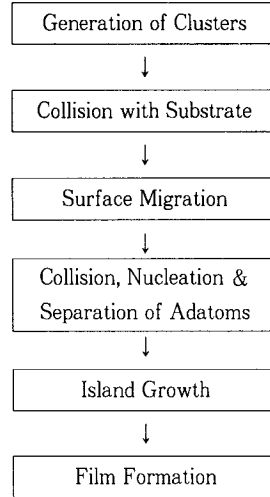


Fig. 4. Flow diagram of the computer simulation.

이하의 에너지 상태의 입자가 island의 step site에 도달하게 되면 결합하여 성장하게 된다. 본 연구에서는 island들이 성장을 계속하여 서로 다른 island들이 만나 형성된 경계를 결정입자 경계로 취급하였다.

위에 열거한 전산모사 수행과정을 Fig. 4에 간략하게 나타내었다.

#### 4. 결과 및 고찰

금속, 금속간 화합물, 반도체, 산화물, 질소화합물, 탄화물 등의 ICB 증착시의 가속전압은  $1 \sim 8\text{kV}$  정도의 범위이고, 기관 온도는  $20 \sim 700^\circ\text{C}$  정도의 범위를 가진다. 금속물질의 증착에 대하여 classical 모델과 atomistic 모델로 구한 임계 핵 크기는  $1 \sim 15$  원자/핵 정도의 값이 보고되어 있으며[13], Si/Si 증착시 임계 핵 크기는 약 110개로 매우 큰 값이 보고되어 있다[14]. 본 연구에서는 전산모사에 사용한 계산영역의 크기를 고려하여 임계 핵 크기를  $2 \sim 20$ 의 범위에서 변화시켰다. 표면이동 활성화 에너지,  $E_m$ 은 실험의 결과를 atomistic 모델로 계산한 값이 여러 문헌에 보고되어 있다[15-19].  $E_m$ 의 범위는 약  $0.05 \sim 0.4\text{eV}$ 이다. 본 연구에서는  $0.1 \sim 0.3\text{eV}$ 의 값을 이용하여  $E_m$ 의 영향을 고찰하였다. 다음에 보여진 결정입자의 크기를 나타낸 그림은 3차원적으로 성장한 박막의 첫번째 층(layer)에 있는 island들의 경계로부터 얻은 profile이고, 검은 부분은 물질이 증착되지

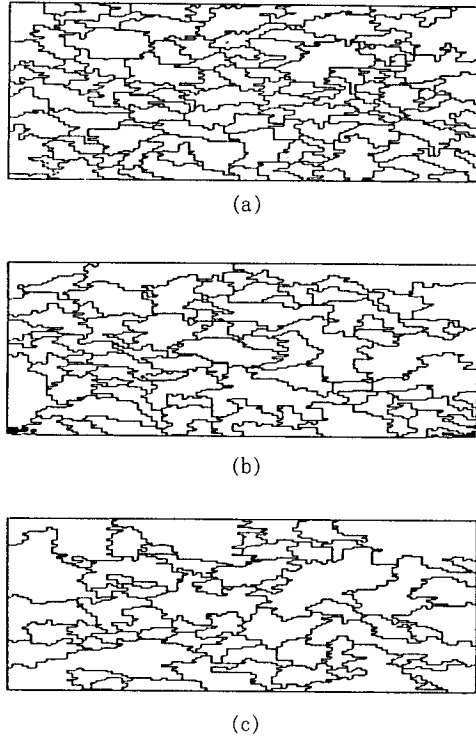


Fig. 5. Grain boundaries as a function of acceleration voltage. ( $n^*=10$ ,  $E_m=0.1$  eV,  $T_s=373$ K)  
 (a) Acc=0kV (b) Acc=4kV (c) Acc=8kV

않은 부분을 표시한 것이다. 표면 평활도의 변화를 보인 그림은 ICB에 의하여 형성된 박막의 임의의 단면을 잘라 그 형태를 나타낸 것이다.

#### 4. 1. 가속전압의 영향

Fig. 5는  $n^*$ 가 10,  $E_m$ 이 0.1eV, 기판온도가 373K 인 조건하에서 가속전압을 변화시킬 때 형성된 결정입자들의 크기 변화를 나타낸 그림으로서, 가속전압이 커질수록 결정입자들의 크기가 커짐을 알 수 있다. 이는 가속전압이 커질수록 클러스터를 구성하고 있는 각 입자의 운동에너지가 증가하기 때문이다. 즉, 각 입자의 운동에너지가 증가하면 입자들 사이의 상호작용력을 극복하고 움직일 수 있는 거리가 증가한다. 표면이동거리의 증가는 입자들이 새로운 핵을 형성하여 island를 이루는 확률보다는 이미 형성된 island의 step으로 이동하여 성장할 확률을 높아지게 한다. Fig. 6의 결정입자크기의 분포도는 결정입자들

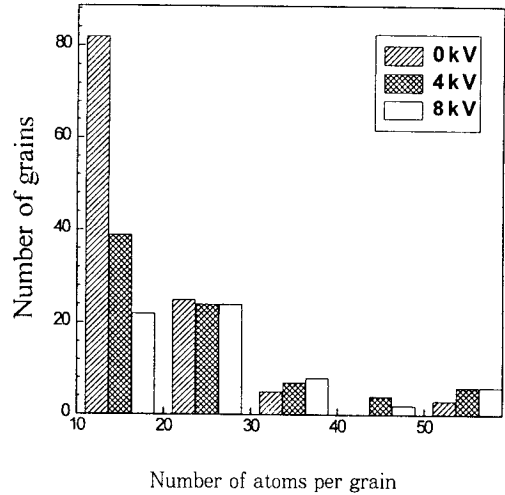
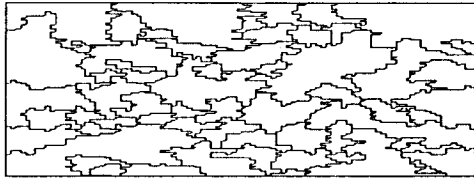


Fig. 6. Grain size distribution as a function of acceleration voltage.

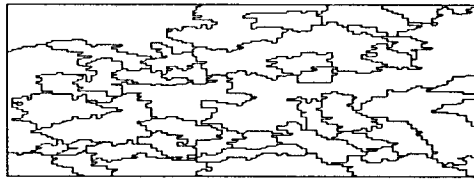
크기별로 나눈 것으로서 50개 미만의 원자로 이루어진 결정입자까지는 10원자 단위로 나누었고, 50개 이상의 원자로 이루어진 결정입자는 구분하지 않고 총 수를 나타내었다. 그림에서 알 수 있듯이 가속전압이 커질수록 작은 결정입자의 수가 감소하거나 큰 결정입자의 수가 증가함을 확인할 수 있으며, 이로부터 결정입자의 평균적인 크기 역시 증가하였음을 알 수 있다. 이상의 관찰에서 가속전압은 생성되는 island의 크기를 결정하는 주요인자임을 알 수 있다.

#### 4. 2. 기판온도의 영향

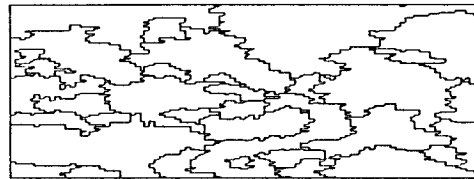
Fig. 7은 가속전압이 8kV,  $E_m$ 이 0.1eV,  $n^*$ 가 10 일 때 373, 673, 973K의 기판온도에서 결정입자 경계의 변화를 보인 것이다. Yamada 등[20]은 실험을 통하여 기판의 표면온도가 높을수록 가속전압의 효과가 뚜렷이 나타난다고 보고하고 있다. 또한 기판온도는 증착량에도 많은 영향을 주고 있다. 기판의 온도가 100~200°C 정도 상승하면 클러스터를 구성하고 있는 입자가 기판으로부터 받는 열에너지는 약  $10^{-2}$  eV/atom 정도 증가한다. 이는 수~수 십eV의 운동에너지에 비하여 매우 작은 양이므로 열에너지에 의한 입자의 표면이동속도의 증가 및 탈착속도의 증가는 운동에너지에 의한 효과에 비하여 매우 미미할 것이다. 하지만 기판온도의 증가로 인하여 운동에너지의 소산속도가 느려지면 상대적으로 입사시의 높은 운동 에너지를 적게 소산하면서 이동하게 된다. 따라서 기



(a)

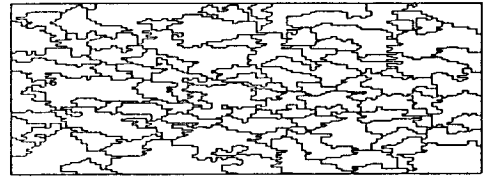


(b)

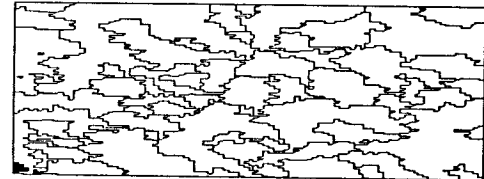


(c)

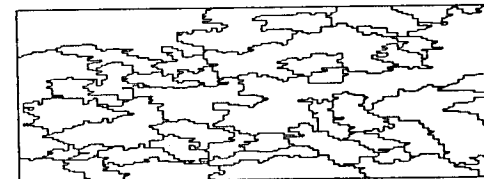
Fig. 7. Grain boundaries as a function of substrate temperature. (Acc=8kV,  $E_m=0.1eV$ ,  $n^*=10$ )  
 (a)  $T_s=373K$  (b)  $T_s=673K$  (c)  $T_s=973K$



(a)



(b)



(c)

Fig. 9. Grain boundaries as a function of  $E_m$ . (Acc=8kV,  $T_s=673K$ ,  $n^*=10$ )  
 (a)  $E_m=0.3eV$  (b)  $E_m=0.2eV$  (c)  $E_m=0.1eV$

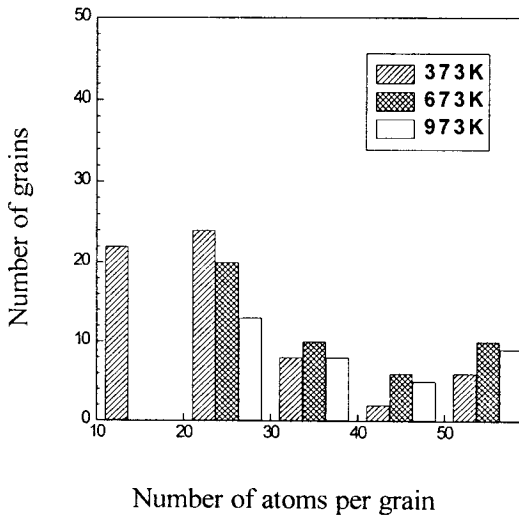


Fig. 8. Grain size distribution as a function of substrate temperature.

관위에 도달한 입자가 다시 기상으로 되돌아갈 확률이 증가하게 되므로 증착량이 감소할 것이라 추정할 수 있다. ICB와 증착방법은 비슷하지만 운동에너지의 영향이 없는 evaporation이나 sputtering과 비교할 때 이러한 추정의 타당성은 보다 명확해진다. Evaporation이나 sputtering의 경우에는 기판온도가 100~200°C 정도 변해도 증착량에는 큰 변화가 없다. 이는 이들 공정에서 기판온도는 단지 열에너지의 증가효과만을 주기 때문이다. Fig. 7로부터 기판온도가 높을수록 표면과 입자간의 인력이 감소하여 입자의 운동에 따른 에너지 소산정도가 감소하게 되며, 그 결과 hopping횟수의 증가로 인하여 island의 크기가 커지는 효과가 나타난다는 추정이 근거가 있음을 확인할 수 있다. Fig. 8로부터 기판온도가 증가할수록 평균 결정입자의 크기가 커지게 됨을 확인할 수 있다.

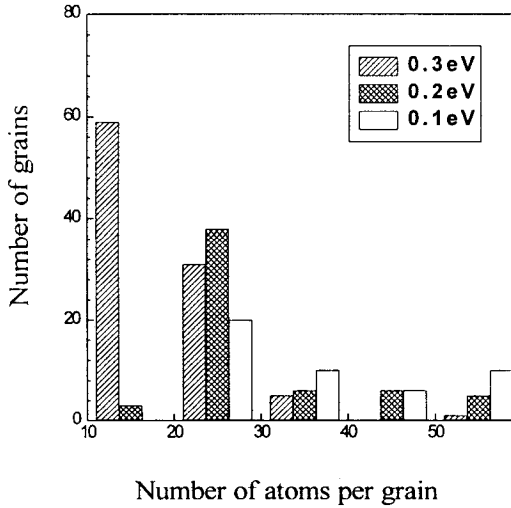


Fig. 10. Grain size distribution as a function of surface migration activation energy.

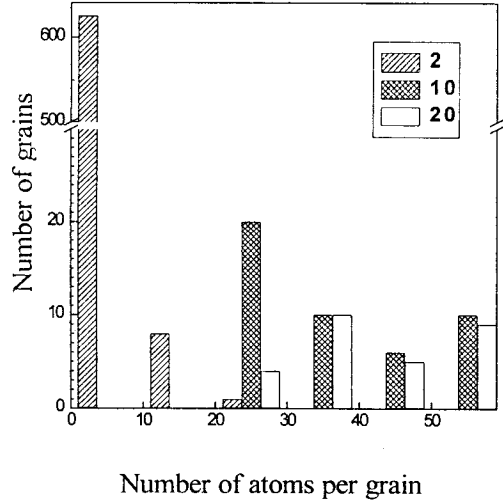


Fig. 12. Grain size distribution as a function of critical nuclei size.

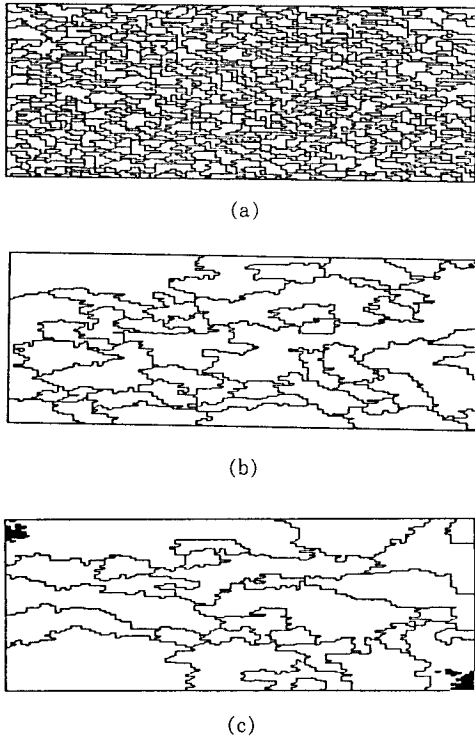


Fig. 11. Grain boundaries as a function of critical nuclei size.

(a)  $n^* = 2$  (b)  $n^* = 10$  (c)  $n^* = 20$

### 4. 3. 표면이동 활성화 에너지의 영향

Fig. 9는 가속전압 8kV, 기관온도 673K, 임계 핵 크기 10일 때 표면이동 활성화 에너지,  $E_m$ 을 0.3, 0.2, 0.1eV로 변화시키면서 나타나는 결정입자 경계의 변화를 보인 것이다.  $E_m$ 은 증착되는 입자와 기관물질 사이의 상호작용에 의하여 결정되는 값으로 전체 hopping횟수와  $\zeta$ 에 비례하는 에너지 소산시간에 큰 영향을 준다. 이는 증착물질의 표면 이동 에너지 장벽이 낮아지면 상대적으로 에너지 소산시간이 길어지는 효과가 나타나기 때문이다. 즉, 같은 온도, 같은 가속전압의 조건에서  $E_m$ 값이 감소할수록 hopping횟수인  $N_p$ 와  $N_h$ 는 크게 증가한다. Fig. 10의 결정입자 크기 분포는  $E_m$ 이 감소할수록 평균 결정입자 크기가 증가한다는 사실을 보여준다.

### 4. 4. 임계 핵 크기의 영향

Fig. 11은 가속전압 8kV, 기관온도 673K,  $E_m$  0.1eV에서  $n^*$ 를 2, 10, 20으로 바꾸어가면서 나타나는 결정입자 경계의 변화를 보인 것이다.  $n^*$ 는 입자 상호간의 인력, 기관의 온도 등의 함수로서 기관온도에 영향을 받는 이유는 기관온도가 높을수록 핵으로부터 입자가 분리될 확률이 높아지고 따라서 안정한 핵을 이루기 위해서는 더욱 많은 입자들이 필요하게 되기 때문이다.

결과를 살펴보면  $n^*$ 가 2인 경우에는 상당히 작

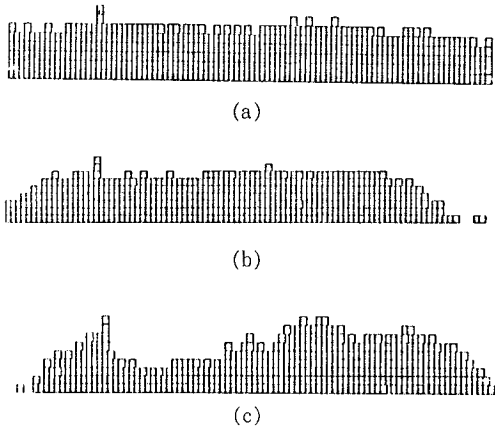


Fig. 13. Surface roughness as a function of  $N_h$ .

(a)  $N_h=10$  (b)  $N_h=30$  (c)  $N_h=100$

은 결정입자가 나타나는 반면, 10이상인 경우에는 어느 정도 성장된 결정입자가 형성된다. 이는  $n^*$ 가 증가할수록 상대적으로 안정한 클러스터를 형성하기가 어렵기 때문이다. 즉,  $n^*$ 가 10이상인 경우는 두 개의 입자들이 모여도 다시 분리될 수 있기 때문에 두 개의 입자만 모여도 안정한 핵을 이루는  $n^*$ 가 2인 경우보다 핵을 형성하여 island를 만드는 확률이 상대적으로 적어진다. 이러한 경향은  $n^*$ 가 증가할수록 더욱 두드러지게 나타난다. 따라서 임계 핵 크기에 따라 형성되는 박막의 성질이 크게 변함을 알 수 있다. Fig. 12로부터 임계 핵 크기가 커질수록 입자의 평균 크기가 급격히 커짐을 확인할 수 있다.

#### 4.5. 표면 평활도의 변화

Fig. 13은  $N_h$ 에 따른 표면 평활도의 변화를 보인 것이다. 이 그림에서 예시한  $N_h$ 는  $T_s$ 가 673K,  $E_m$ 이 0.3인 경우에 가속전압이 1kV이하일 때의 작은 값들이다. 그림에서 (a)는 클러스터가 입자들간의 인력을 극복할 수 있는 정도의 충분한 에너지를 갖지못하여 붕괴가 원활히 일어나지 않아 표면 평활도가 나쁜 막이 형성된 경우이고, (c)는 충분한 에너지에 의하여 클러스터의 붕괴가 제대로 일어난 경우로 박막이 한층씩 성장하여 표면 평활도가 좋은 막이 형성된 경우이다.  $N_h$ 는 가속전압과 기관온도에 비례하고, 표면 이동 활성화 에너지에 반비례하는 모사변수이므로, 결과로부터 가속전압, 기관온도, 표면 이동 활성화 에너지가 박막의 평활도에 복합적으로 작용함을 알

수 있다.

## 5. 결 론

본 연구에서는 ICBD에 의한 박막형성기구를 설명하기 위하여 Monte-Carlo방법에 근거한 전산모사 프로그램을 개발하였다. 클러스터의 운동에너지, 기관의 온도, 그리고 클러스터를 구성하고 있는 입자들과 기관과의 인력이 입자의 표면이동속도와 핵형성에 미치는 영향을 알아볼 수 있는 모델을 정립하여 박막의 결정입자 크기변화 및 표면 평활도의 변화를 살펴보았다.

가속전압이 커질수록 입자의 운동에너지가 증가하고 결과적으로 입자의 표면이동이 증대되어 결정입자의 크기가 커짐이 관찰되었으며, 이는 이미 보고된 실험결과들과 일치하고 있다[1-4]. 기관의 온도가 높거나 입자와 기관사이의 상호작용력이 작을수록 입자와 기관사이의 마찰계수가 감소하므로 입자의 운동 에너지 소산속도가 느려지며, 이는 전체 hopping횟수를 증가시켜 결정입자를 크게함을 알 수 있었다.  $n^*$ 가 클수록 island를 형성하기보다는 island에 부착될 확률이 높아져 결정입자의 크기가 커졌다. 또한, 가속전압과 기관온도가 크고,  $E_m$ 이 작을수록 표면 평활도가 향상됨을 관찰할 수 있었다.

본 전산모사에 의하여 가속전압, 기관온도, 표면이동 활성화 에너지, 그리고 임계 핵 크기를 알면 island 성장모습의 변화를 예측할 수 있으며, 이 결과는 원하는 특성의 박막을 얻기 위한 최적의 ICBD장치 운전 조건을 도출하는 데 효과적으로 이용될 수 있을 것이다.

## 감 사

본 논문은 1994년도 한국학술진흥재단의 공모과제(신진교수 04 E 0330)연구비에 의하여 연구되었음.

## 참고문헌

1. T. Takagi, "Ionized-Cluster Beam Deposition and Epitaxy", Noyes, N.J.(1988).
2. T. Takagi, I. Yamada, and A. Sasaki, *Thin Solid Films*, **39**, 207(1976).
3. T. Takagi, I. Yamada, K. Matsubara, and H.



- Takaoka, *Thin Solid Films*, **45**, 318(1978).
4. I. Yamada, F. W. Saris, T. Takagi, K. Matsubara, H. Takaoka, and S. Ishiyama, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **19**, 181(1980).
  5. T. Takagi, *Thin Solid Films*, **92**, 1(1982).
  6. H. Hsieh and R. S. Averback, *Phys. Rev.*, **B42**, 5365(1990).
  7. H. Hsieh and R. S. Averback, *Nucl. Instr. Meth.*, **B59/60**, 103(1991).
  8. K. H. Muler, *J. Appl. Phys.*, **61**, 2516(1987).
  9. I. Yamada, H. Inokawa, and T. Takagi, *Thin Solid Films*, **124**, 179(1985).
  10. R. S. Berry, S. A. Rice, and J. Ross, "Physical Chemistry," p.1101, John Wiley & Sons(1980).
  11. K. Bindel, "Monte Carlo Methods in Statistical Physics," p.150, Springer-Verlag Heidelberg, N. Y.(1979).
  12. Kittel, "Introduction to Solid State Physics," p. 646, John Wiley & sons(1971).
  13. M. J. Stowell, *Thin Solid Films*, **21**, 697(1973).
  14. V. N. E. Robinson, and J. L. Robins, *Thin Solid Films*, **20**, 155(1974).
  15. J. A. Venables, *Phil. Mag.*, **27**, 697(1973).
  16. H. Poppa, *J. Appl. Phys.*, **38**, 3882(1967).
  17. B. Lewis, *Thin Solid Films*, **2**, 353(1968).
  18. T. Takagi, I. Yamada, M. Kunori, and S. Kobiyama, Proc. 2nd Int. Conf. Ion Sources, Vienna, p.790(1972).
  19. T. Takagi, I. Yamada, and A. Sasaki, *Vac. Sci. Technol.*, **12**, 1128(1975).
  20. I. Yamada, H. Inokawa, and T. Takagi, *J. Appl. Phys.*, **56**, 2746(1984).