

## Depth Profiling에서 Sputtering Rate의 영향

김주광 · 성인복 · 김태준 · 오상훈 · 강석태†

연세대학교 물리학과, 원주 220-710  
(2003년 8월 6일 접수)

### The influence of sputtering rate during depth profiling

Joo Kwang Kim, In bok Sung, Tae Jun Kim, Sang Hoon Oh, and Suk Tai Kang†

Department of Physics, Yonsei University, Wonju 220-710  
(Received August 6, 2003)

#### 요 약

시료에 주입된 이온의 깊이방향에 따른 농도분포를 알아보기 위하여 시료표면을 sputtering 하면서 튀어나온 주입된 이온을 depth profiling한다. Depth profiling 측정 시에 깊이방향에 영향을 주는 sputtering rate가 변화하는 효과를 SRIM simulation을 이용하여 계산하였다. 시료에 이온이 주입하게 되면 시료의 원자밀도는 약간 증가하게 되는데, 그 결과로 sputtering yield가 변화하게 된다. 이러한 변화가 결과적으로 depth profile 측정시에 깊이방향에 영향을 줄 수 있는 sputtering rate를 변화시키는 원인이 된다.

SRIM(Stopping and Range of Ions in Matter) Monte Carlo simulation code를 사용하여 이온주입에 의한 시료의 원자밀도의 변화에 따른 sputtering yield를 구하여 sputtering rate를 계산하고, 그 차이가 depth profiling 측정에서 깊이방향 분포에 영향을 줄 수 있다는 것을 확인하였다.

주제어 : depth profiling, sputtering rate, SRIM simulation

#### Abstract

To find the concentration according to the depth-direction of ions implanted in the sample, with sputtering of the sample surface, one needs the depth profiling of ion implanted in the sample. On measuring of depth profiling, the sputtering rate to affect depth direction, is calculated by SRIM simulation. When ion is implanted in the sample, the atomic density of the sample rises up a little, and it alters sputtering yield. This alteration then causes differences of sputtering rate to affect depth-direction, on measuring of depth profiling.

With the usage of SRIM Monte Carlo simulation code, one calculates sputtering rate, with sputtering yield by the alteration of atomic density of the sample through ion implantation. As a result, it goes to prove that its difference affects depth distribution, on measuring of depth profiling.

Key Words : depth profiling, sputtering rate, SRIM simulation

---

† E-mail : stkang@dragon.yonsei.ac.kr

## 1. 서 론

이온주입 기술은 이온을 높은 에너지로 시료표면에 입사시켜 시료 표면에 개질된 층을 만드는 대표적인 표면개질 기술이다. 주입되는 이온의 양이나 에너지에 따라서 주입 깊이, 분포 및 조성을 쉽게 조절 할 수 있어서 고집적회로용 반도체 제조과정에서 주로 이용된다. 최근에는 금속, 세라믹, 고분자 등 첨단 소재의 표면 개질을 통하여 이들 소재의 표면특성을 향상시키려는 연구가 활발히 이루어지고 있다. InP시료는 다양한 전자와 광전자의 특성이 있어 현재 광통신 영역에서 연구되는 대표적인 반도체이다. 최근에는 InP 시료에 주입조건을 다양하게 변화시켜서, 생성된 damage의 변화에 따른 특성이 활발하게 연구되고 있다. 주입된 이온의 깊이 방향 분포(depth profile)를 구하기 위해서 실험적으로는 주로 SIMS(Secondary Ion Mass Spectrometry)를 이용하여 측정한다. SIMS로 측정할 때에 입사이온을 분석하고자하는 시료표면에 입사시키면 입사이온과 시료원자와의 충돌 cascade의 결과로 시료의 표면으로부터 중성 입자, 대전 입자, 전자 [1], X-선 및 광자 등이 방출되는데, 이때 시료표면에서 튀어나오는 대전입자를 검출하여 깊이방향에 따른 주입된 원소의 depth profile을 측정한다.

시료에서 이차이온이 방출되는 수율은 시료의 표면결합 에너지, 원자밀도, matrix 효과와 diffusion에 의한 transport 등 여러 가지 요인들에 의하여 영향을 받는다. 본 연구에서는 시료에 주입된 이온 주입량의 변화에 따라서 시료에 주입된 이온의 depth profile 측정시에 나타나는 sputtering rate의 변화를 SRIM simulation [2]을 이용하여 계산하고, 그 변화가 depth profile의 깊이방향에 영향을 준다는 것을 확인하였다.

## 2. 이 론

### 2.1 Partial sputtering

이온이 시료의 표면에 입사하게 되면 입사 이온과 시료 원자와의 원자 충돌과정에 의하여 시료의 원자들은 시료 밖으로 튀어나오게 된다. 이렇게

sputter되는 원자들의 비율은 시료의 원자 밀도와 표면결합 에너지 [3], 입사이온 및 시료원자의 질량, 시료 결정면의 방향, 입사 이온의 에너지, 입사각 등에 의하여 달라진다.

그러나 시료가 합금일 경우에 그 구성 성분의 비율, 각 원소의 표면결합 에너지와 원자 질량에 따라 선택적으로 sputtering 되기도 한다. 합금이나 화합물의 partial sputtering yield의 비는 다음과 같다 [4].

$$\frac{y_1}{y_2} = \frac{G_1(E_0)}{G_2(E_0)} \frac{(dE_0/dx)_1}{(dE_0/dx)_2} \frac{U_2^{1-2m_2}}{U_1^{1-2m_1}} \quad (1)$$

$G_i(E_0)$ 는 입사 이온에 의해 합금 속에서 움직이는  $i$ -원소의 양이고,  $(dE_0/dx)_i$ 는  $i$ -원소로 이루어진 시료의 깊이 당 에너지 손실을 나타낸다.  $U_{0i}$ 는 합금에서  $i$ -원소의 표면결합 에너지,  $m_i$ 는 power-law scattering 상수이다.

$$\frac{dE_0}{dx} = -NS(E_0) \quad (2)$$

$N$ 은 원자밀도,  $S(E_0)$ 는 nuclear stopping cross section이다.  $G_i(E_0)$ 는  $i$ -원자의 농도인  $C_i$ 에 의존하기 때문에 식 (1)은 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\frac{y_1}{y_2} = \frac{C_1}{C_2} \frac{S_{21}}{S_{12}} \frac{U_2^{1-2m_2}}{U_1^{1-2m_1}} \quad (3)$$

$S_{ij}$ 는  $i$ -원자가  $j$ -원자와 충돌할 때의 nuclear stopping cross section이며, sputter 되는 이온의 에너지 값이 비슷하므로  $m_1$ 과  $m_2$ 는  $m$ 으로 바뀔 수 있다. 한편,

$$S_{21}/S_{12} = (M_2/M_1)^{2m}, \quad (4)$$

이므로 [5],

$$\frac{y_1}{y_2} = \frac{C_1}{C_2} \left( \frac{M_2}{M_1} \right)^{2m} \left( \frac{U_2}{U_1} \right)^{1-2m} \quad (5)$$

로 바뀔 수 있다 [6]. 여기서  $M$ 은 원자 질량이다. 이렇게 하여 합금이나 화합물의 partial sputtering yield비를 계산할 수 있다.

## 2.2 SRIM simulation

입사이온이 시료표면에 입사되어 진행할 때에 시료원자들과 충돌하면서 이온의 에너지를 잃고 결국 시료내부에서 정지할 때까지의 3차원적인 과정을 SRIM simulation [2]으로 계산하여 sputtering yield를 얻는다. 입사이온이 에너지를 잃는 과정을 입사이온과 원자핵과의 충돌에 의한 과정과 전자들과의 상호작용에 의한 과정으로 나누어 다음 식으로 계산한다.

$$S_n(E) = \frac{8.462 \times 10^{-15} Z_1 Z_2 M_1 S_n(\epsilon)}{(M_1 + M_2)(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})} \quad (6)$$

$$S_e(E) = k\sqrt{E} \quad (7)$$

$S_n(E)$ 는 핵의 산란단면적,  $S_e(E)$ 는 전자의 산란단면적,  $Z$ 는 원자번호,  $M$ 은 원자질량,  $k$ 는 비례상수이며  $\epsilon$ 은 환산에너지이다.

입사이온의 초기 에너지가 모두 소멸될 때 까지 시료 내부에서 원자핵 및 전자들과의 충돌은 계속되며, sputtering을 계산하는 과정은 모든 원자들에  $i$ 라는 기호를 부여하고 입사이온과 첫 번째 충돌하는 입자에 1의 숫자가 저장된다. 그리고  $i=1$ 이라는 입자와 충돌하는 입자에는 2의 숫자가 저장되며, 충돌하는 입자도 마찬가지로 충돌의 횟수가 거듭될수록 기호에  $i+1$ 로 정보가 수정되어 저장된다. 이러한 충돌과정을 반복하면서 되튐 입자를 따라가게 되는데, 만약 되튐입자가 시료표면의 결합에너지보다 커서, 시료의 표면을 이탈하게 되면 더 이상 숫자가 카운터 되지 않고, 이러한 입자들을 통계적으로 처리하여 sputtering yield가 계산된다. 이러한 sputtering 현상은 입사 이온과 첫 번째로 충돌한 입자들이 sputter 되기보다는 되튐입자들이 일으킨 연쇄 충돌에 의해서 sputter 될 확률이 더욱 높아지게 된다.

## 2.3 Sputtering rate

Simulation을 이용하여 얻은 partial sputtering yield를 사용하여 sputtering rate를 계산할 수 있다. Total sputtering yield는 partial sputtering yield의 합으로 정의된다 [7,8].

$$Y(\theta) = \sum_{i=1}^{n+1} y_i(\theta) \quad (8)$$

$\theta$ 는 주입된 이온의 dose량이며 [9],  $n+1$ 은  $n$ 가지 구성원소로 된 시료에 주입된 이온의 partial sputtering yield까지 더해진 것을 의미한다.

sputtering rate [10]는 매 초당 시료의 표면에 조사되는 입사이온  $K$ 의 입자 수 ( $N_p$ )

$$N_p(K) = I_p \cdot \frac{n}{e} \quad (9)$$

로 계산된다.  $I_p$ 는 입사이온 전류,  $n$ 은 입사이온의 종류 ( $O_2^+$ 이면,  $n=2$ ),  $e$ 는 전하량이다.

매 초당 sputter되는 입자 수 ( $N_s$ )는

$$N_s = Y \cdot N_p(K) \quad (10)$$

이며, 식에서  $Y$ 는 앞에서 언급한 total sputtering yield이다. 이 식을 이용하여 매 초당 제거되는 시료의 부피  $\dot{V}$ 는

$$\dot{V} = N_s / N \quad (11)$$

이다.  $N$ 은 시료의 원자밀도이다. 매 초당 제거되는 부피를 입사이온이 입사하는 면적( $A$ )으로 나누면 바로 시간당 변화하는 깊이 방향, 즉 sputtering rate  $\dot{z}$ 를 계산할 수 있다.

$$\dot{z} = \left( \frac{Y \cdot I_p \cdot n}{N \cdot e \cdot A} \right) \quad (12)$$

시간당 시료가 sputter되는 깊이인 sputtering rate가 일정하게 유지되어야 depth profile을 정확하게 측정할 수 있다.

## 3. 결과 및 고찰

그림 1은 Al 이온을 InP 시료에 40 keV의 에너지로 이온 주입했을 때에 InP 시료 속에서의 Al 이온의 깊이방향 분포를 SRIM simulation으로 계산한 값이다.  $R_p$ (projected range)의 계산값은 572 Å이고,  $\Delta R_p$ (range straggling)는 303 Å이다. 한편, Kyllonen [11]등이 Al 이온의 주입량이  $10^{15}$  ions/cm<sup>2</sup>인 경우

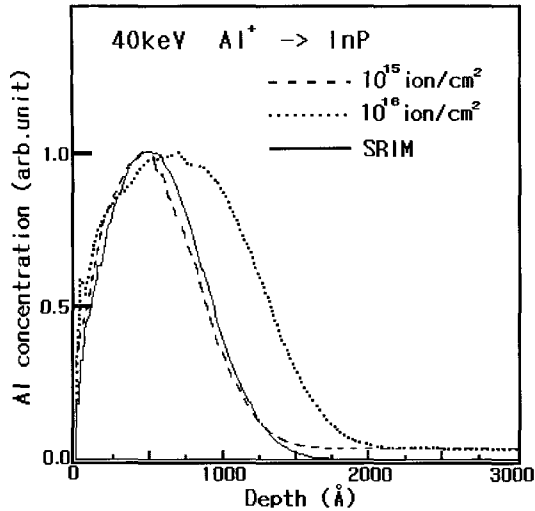


Fig 1. Depth profiles of Al in InP.

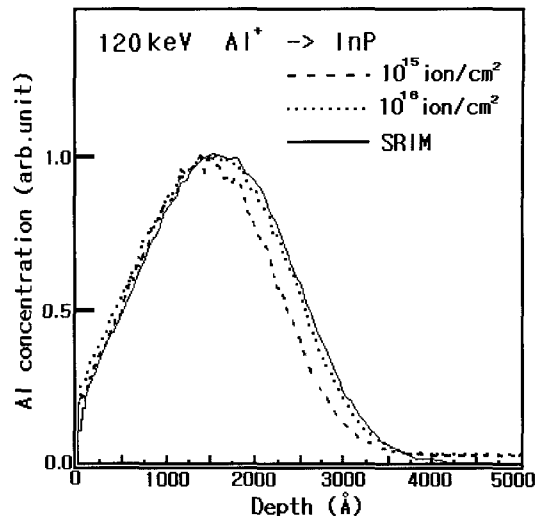


Fig 2. Depth profiles of Al in InP.

에 SIMS로 측정된  $R_p$ 의 실험값은 490 Å으로 계산 값과 비교적 잘 일치하고 있다. SIMS 측정에서 사용된 실험조건은 5 keV  $O^+$ 이온, 이온전류는 100 nA 이고 진공도는  $5 \times 10^{-8}$  Pa이다. Al 이온의 주입량을  $10^{15}$  ions/cm<sup>2</sup>에서  $10^{16}$  ions/cm<sup>2</sup>로 증가시켰을 때에 SIMS로 측정된 depth profile의  $R_p$  값이 490 Å에서 690 Å로 약 41% 정도가 깊이방향에 따라서 커진 것을 알 수 있다. 이것은 depth profile을 측정할 때에 깊이방향에 영향을 주는 sputtering rate가 늦어져서 결과적으로  $R_p$  값이 증가되었다는 것을 말해주고 있다. Depth profiling 측정 시에 깊이방향에 따라서 sputtering rate에 영향을 주는 중요한 요소 중의 하나는 단위 체적 당 들어있는 시료원자의 개수이다 [3]. Al 이온주입량이  $10^{15}$  ions/cm<sup>2</sup>와  $10^{16}$  ions/cm<sup>2</sup>일 때 각각  $R_p$  부근인 Al rich layer에서의 Al 농도는  $1.26 \times 10^{20}$  atom/cm<sup>3</sup>,  $8.44 \times 10^{20}$  atom/cm<sup>3</sup> 이다. Al이 InP 시료에 주입됨으로써 InP 시료의 원자밀도가 증가하게 된다. 이를 계산하여 simulation의 입력 자료로 사용하였다. 그림 2는 Al 이온을 InP 시료에 120 keV의 에너지로 이온 주입했을 때에 InP 시료 속에서의 Al 이온의 깊이방향 분포를 SRIM simulation으로 계산한 값을 보인다.

SRIM simulaton으로 계산한  $R_p$  값은 1614 Å이고,  $\Delta R_p$ 는 761 Å이다. Al 이온주입량이  $10^{15}$  ions/cm<sup>2</sup>

와  $10^{16}$  ions/cm<sup>2</sup>일 때 각각  $R_p$  점에서의 Al 농도는  $5.15 \times 10^{19}$  atom/cm<sup>3</sup>,  $4.83 \times 10^{20}$  atom/cm<sup>3</sup>이고, 이 값을 simulation 계산에 입력하였다. 이온주입량을  $10^{15}$  at./cm<sup>2</sup>와  $10^{16}$  at./cm<sup>2</sup>으로 변화시켰을 때에 SIMS로 측정된 Al 이온의 depth profile의  $R_p$ 는 각각 1380 Å와 1410 Å으로 이온주입량에 따라서 큰 차이를 보이지 않는다. 이것은  $R_p$ 점 주위에서 주입된 Al 이온의 개수는 120 keV로 주입되었을 경우가 40 keV로 주입되었을 경우보다 적어지므로 sputtering rate에 기여를 별로 하지 않기 때문이다.

표면결합 에너지 값은 SRIM 프로그램의 기본값인 Al은 3.336eV, In은 2.49 eV이고, P는 3.27 eV를 사용했다.

실험에서 쓰인 InP 시료도 화합물이고 또한 Al이 이온이 주입되어 있으므로 시료의 구성원소는 3가지 원소가 된다. 계산에서 상대적인 비율을 구함으로써 몇 가지 변수를 상쇄시키도록 하였다. 즉 시료에서 In과 P의 원자들은 그 비율이 1:1로 고정되어 있고, Al 이온의 주입량에 따라서 시료내부의 원자밀도만 변화되므로 이온주입량이  $10^{16}$  ions/cm<sup>2</sup> 일 때의 Al과 In의 partial sputtering yield 비와  $10^{15}$  ions/cm<sup>2</sup> 일 때의 Al과 In의 partial sputtering yield 비를 식 (5)에 대입하여 비례식으로 나타내면 이온주입후의 In과 Al의 표면결합 에너지와 원자질량은 각각 같으

므로 상쇄되고, 남은 항은

$$\frac{y_{Al6}}{y_{In6}} : \frac{y_{Al5}}{y_{In5}} = \frac{C_{Al6}}{C_{In6}} : \frac{C_{Al5}}{C_{In5}} \quad (13)$$

가 된다.

그리고 SRIM simulation을 이용하여 sputtering yield 값을 계산하기 위한 초기 입력 값은 실험값의  $R_p$  점에서의 시료의 세 성분의 농도 값이다. InP의 시료에 40keV의 에너지로 Al 이온을 주입 했을 때 시료 속에서의 세성분의 농도비는 이온주입량이  $10^{15}$  ions/cm<sup>2</sup> 일 때 Al이 0.33, In은 49.835이고 P는 49.835이며,  $10^{16}$  ions/cm<sup>2</sup> 일 때 Al이 2.2, In이 48.9이고 P는 48.9이다. 이 값의 농도와 표 1의 simulation으로 계산한 sputtering yield값을 식 (13)에 대입한 결과 이 식이 성립하는 것을 알 수 있다. 120 keV로 Al 이온을 주입한 시료에서 주입량이  $10^{15}$  ions/cm<sup>2</sup>일 때 세 성분의 농도가 Al이 0.125, In이 49.937이고 P는 49.937이며  $10^{16}$  ions/cm<sup>2</sup>일 때 세성분의 농도가 Al이 1.3, In이 49.35이고 P는 49.35이었으며, 이 경우도 마찬가지로 표 2의 simulation결과와 농도는 식 (13)을 만족하는 결과를 얻었다.

또한 표 1, 2를 보면 In과 P의 sputtering yield의 값은 Al의 주입량이 변함에 따라 영향을 받는 경향을 보인다. Al의 분포밀도에 의해 total sputtering yield에 영향을 받는다는 것을 알 수가 있다.

SRIM simulation code로 얻어진 sputtering yield를 사용하여, 식 (12)에 대입하면 sputtering rate를 계산할 수 있다. 이온주입량이 각각  $10^{15}$  ions/cm<sup>2</sup>와  $10^{16}$  ions/cm<sup>2</sup>일 때의 sputtering rate의 비례식을 사용하면 입사이온의 변수가 상쇄되어 다음과 같은 결과를 얻는다.

$$\dot{z}_{15} : \dot{z}_{16} = \frac{Y_{15}}{N_{15}} : \frac{Y_{16}}{N_{16}} \quad (14)$$

Table 1. Simulation을 이용한 sputtering yield(40 keV).

Al 이온주입량 (ions/cm <sup>2</sup> )	sputtering yield(atom/ion)			
	Al	In	P	Total
$10^{15}$	0.00496	1.25	0.7975	2.052
$10^{16}$	0.0328	1.23	0.7869	2.052

Table 2. Simulation을 이용한 sputtering yield(120keV).

Al 이온주입량 (ions/cm <sup>2</sup> )	sputtering yield(atom/ion)			
	Al	In	P	Total
$10^{15}$	0.00188	1.26	0.7979	2.058
$10^{16}$	0.0192	1.20	0.7970	2.064

Table 3. 이온주입량에 따른 sputtering rate 비

	$10^{15}$	$10^{16}$
40keV	0.517	0.508
120keV	0.519	0.516

표 3은 SRIM simulation을 이용하여 Al 이온의 주입량이  $10^{15}$  ions/cm<sup>2</sup>와  $10^{16}$  ions/cm<sup>2</sup> 일 때에 입사 이온의 에너지가 40 keV와 120 keV에 대해서 각각 계산한 sputtering rate 값을 보여준다.

입사에너지가 40keV인 경우에 Al 이온의 주입량이  $10^{15}$  ions/cm<sup>2</sup>와  $10^{16}$  ions/cm<sup>2</sup>에서 sputtering rate의 변화를 보인다. 이온이 주입된 시료의 분포밀도가 높은 곳에서는 sputtering rate가 낮아진다. 즉 일정한 시간에 대해서 sputtering되는 깊이는 깊어진다.

#### 4. 결 론

InP 시료 속에 주입된 Al 이온의 이온 주입량의 변화에 따라서 SIMS로 depth profile을 측정할 때에 시료의 sputtering yield가 변화하는 것을 simulation으로 확인하였다. 이것은 많은 Al 이온을 InP 시료에 주입함으로 인하여 시료의 원자밀도가 증가하게 되어 sputtering yield의 변화를 일으키는 원인이 되고 있다. SIMS로 depth profile을 측정할 경우에 측정시간을 sputter된 시료의 깊이로 환산하고, 시료에서 튀어나오는 이차이온의 세기로 depth profile을 작성한다. 그러므로 측정 중에 sputtering rate가 변화하게 되면 depth profile의 깊이방향도 따라서 변화하게 된다. Sputtering 완료 후에 총 측정시간을 crater의 최종 깊이로 환산하여 시간을 sputtering 된 깊이로 하여 depth profile을 작성하므로 sputtering rate가 일정해야 정확한 depth profile을 측정할 수 있다.

주입된 Al 이온의 양이 InP 시료의 원자밀도에

영향을 미칠 정도가 되면 그것이 partial sputtering yield, total sputtering yield와 sputtering rate에 영향을 미치게 되므로 깊이방향의 측정에 영향을 주게 된다. 따라서 주입량  $10^{16}$  ions/cm<sup>2</sup>, 40 keV 의 에너지로 Al 이온을 주입한 InP 시료를 이온 조사한 경우에 sputtering rate가 늦어지게 되어  $R_p$  점이 뒤쪽으로 이동하는 결과를 얻게 된다. 그러므로 SIMS로 주입된 불순물 원소의 정확한 depth profile을 측정하고자 할 경우에는 이온주입량에 따라서 주의 기울일 필요가 있다.

## 후 기

본 연구는 2003년도 연세대학교 매지학술연구소의 연구비지원에 의해 수행되었습니다.

## 참 고 문 헌

- [1] C. H. Moon, D. W. Kang and S. T. Kang, Ungyong mulli (Korea J. of Appl. Phys.) **11**, 58 (1997).
- [2] J. F. Ziegler, J. P. Biersack, U. Littmark, *SRIM : The Stopping and Range of Ions in Matter*, (Per- gamon Press, North Holland, 1985).
- [3] V. I. Shulga, Nucl. Instr. and Meth. B **195**, 291 (2002).
- [4] P. Sigmund, in : *Sputtering by Particle Bombardment I*, ed. R. Behrisch, (Springer, Heidelberg 1981).
- [5] P. Sigmund, J. Vac. Sci. Technol. **17**, 396 (1980).
- [6] N. Q. Lam and K. Johannessen, Nucl. Instr. Meth. B **71**, 371 (1992).
- [7] Y. Zhang, T. Winzell, T. Zhang, I. A. Maximov, E.-L. Sarwe, M. Graczyk, L. Montelius, and H. J. Whitlow, Nucl. Instr. Meth. B **159**, 133 (1999).
- [8] P. Sigmund and A. Grass-Marti, Nucl. Instr. Meth. **182**, 25 (1981).
- [9] Y. Zhang, T. Winzell, T. Zhang, M. Andersson, I. A. Maximov, E. L. Sarwe, M. Graczyk, L. Montelius, and H. J. Whitlow, Nucl. Instr. Meth. B **159**, 142 (1999).
- [10] J. C. Vickerman, A. Brown, N. M. Reed, *Secondary Ion Mass Spectrometry Principles and Application*, (Clarendon Press, Oxford, 1989).
- [11] V. Kyllönen, J. Räsänen, A. Seppälä, T. Ahlgren, and J. Likonen, Nucl. Instr. Meth. B **161**, 673 (2000).