

이온 Implant 및 Sputtering에 대한 전산모사 연구¹⁾

A Study of Ion Implant and Sputtering Simulations

유재권, 김선국, 박현민, 권덕희, 한재민, 이용주

한국원자력연구소

대전광역시 유성구 덕진동 150

요 약

대단히 무거운 원소인 Yb 이온의 포획 및 화학적 추출을 위한 채집판을 효율적으로 설계하고 운용하기 위하여 이온이식과 재료의 sputtering을 입사이온 에너지와 입사각의 광범위한 영역에서 전산모사를 사용한 연구를 수행하였다. 추출판의 형태는 단면이 빗살 형태로 홈이 파인 판이 표면에서 되튀어 나오는 이온을 효과적으로 포획할 수 있음을 알 수 있었고, 화학적 추출 효율을 높이기 위하여 채집판 표면 가까이 이온들이 이식되는 것이 좋기 때문에 입사에너지는 가능한 낮을수록 좋고, 입사이온들이 채집판 표면에서 되튀어 나오면서 에너지가 감소된 이온을 많이 생성하여 채집판 홈의 맞은 편 부분에서 회수할 수 있도록 입사각을 70도 이상으로 유지하면서 운용하는 것이 효율적임을 알 수 있었다. 또한 기화열이 높은 재료가 sputtering을 더 적게 일으키므로 Cu 보다는 Stainless steel (SUS)이 채집판으로서 더 좋으며, SUS304 보다 SUS316이 sputtering을 적게 일으키므로 채집판으로서 더 적합함을 알 수 있었다.

Abstract

In this paper, we investigate ion implanting and sputtering phenomena with Yb ions to enhance the efficiency of the ion capture and chemical extractions of the ions from a extractor. To obtain the optimal design and operating parameters of the extractor, we carried out computer simulation studies over an extensive range of the Yb ion energies and the incident angles. We found that the comb-type extractor can capture the backscattered ions efficiently, and that the lower ion energy yields much less sputtering and shallow implanting that can improve the efficiency in the chemical extraction. The simulation results also show that operations of the incident angles greater than 70° yield the more backscattered Yb ions which can be captured on the other surface faced with the incident plane at much lower energies. Since the larger vaporization heat of materials yields the less sputtering, a SUS316 extractor shows much better performances than the Cu or SUS304 plates.

1) 과학기술부 원자력 중장기 연구개발기금으로부터 재정지원을 받아 수행한 연구임.

1. 서 론

자유이온들이 높은 전기장에 의하여 가속되고 자기장에 의하여 방향을 바꾸면서 진행하여 표적이 나 용기의 벽에 부딪히고 물질 속으로 진행하면서 재료를 구성하고 있는 원자들과 충돌하게 된다. 이러한 충돌과정에서 입사이온들은 자신의 운동에너지를 원자들에게 전달하게 되어 감속되고, 운동에너지를 전달받은 원자들은 재료 속에서 진행하기 시작하고, 입사이온들처럼 다른 원자들과 충돌해 가면서 운동에너지를 전달할 뿐만 아니라 이러한 충돌이 동시 다발적으로 발생하게 한다. 입사이온들은 원자들과 충돌을 반복하면서 재료 내부에서 운동에너지를 완전히 잃어 재료에 이식되기도 하고, 일부는 충돌을 반복하면서 진행방향이 완전히 바뀌어 재료표면을 통하여 되튀어 나오기도 한다.

이온가속기를 사용한 재료의 재질개선 분야에서 여러 가지 이온과 재료에 대하여 이온이식에 대한 연구개발이 진행되고 있으며, 이온에 의한 재료의 sputtering 효과에 대한 공학적 연구는 Tokamak 장치의 divertor 설계 및 운전 분야에서 활발히 수행되고 있을 뿐만 아니라, 이온화시킨 고가의 희귀원소를 포획 및 채집하여 회수하는 분야에서는 채집판의 설계와 운용을 효율적으로 하기 위하여 이식과 재료의 sputtering 현상 모두에 대한 연구가 진행되고 있다¹⁾. 이러한 현상에 대한 실험적 검증은 대단히 중요하나 실험장치의 설계 및 제작에 소요되는 시간과 경비를 감안하면 경제적 타당성이 낮은 경우가 많기 때문에, 먼저 설계사양을 변경하면서 전산모사를 이용한 연구가 선행되어야 한다. 이온가속기나 Tokamak divertor에서는 수소, 중수소, 질소 등과 같이 비교적 가벼운 이온이 금속에 입사하는 경우를 많이 다루고 있으나, 본 논문에서는 대단히 무거운 원소인 Yb 이온의 포획 및 화학적 추출을 위한 채집판에 대하여 이온이식과 재료의 sputtering을 입사이온 에너지와 입사각의 광범위한 영역에서 전산모사를 사용하여 연구를 수행하였다. 추출판의 형태는 단면이 빗살 형태로 홈이 파인 판이 표면에서 되튀어 나오는 이온을 효과적으로 포획할 수 있으나 본 논문에서는 단순한 평판형태의 추출판에 대한 전산모사를 수행한다.

2. Sputtering과 Implant 전산모사법

이온이나 중성원자가 에너지를 가지고 재료표면에 입사하면 이들은 재료표면에서 반사하거나 표적재료에 흡수/이식된다. 어느 경우에서나 이들 입사이온은 표적재료에서 단일 원자와 다중 원자 입자를 생성하면서 전자와 광자를 방출하고 재료를 sputtering 시킨다. 이 때 방출되는 2차 입자들은 중성이거나 하전입자들이며 그 운동에너지는 0에서부터 수 백 eV 정도가 된다. Sputtering 현상은 분기해나가는 충돌모형으로 설명될 수 있다. 즉, 입사이온은 표적원자와 일련의 양자간 충돌을 일으키면서 그 에너지를 전달하고, 에너지를 받은 표적원자 (되튀김 원자)는 더 많은 표적원자와 다시 충돌한다. 이 때 표적표면 밖으로 되튀겨 나오는 표적원자들이 발견되는 것이 Sputtering 현상이다. 원자나 이온이 고체표면을 충돌할 때 표적의 원자가 집단적으로 나타내는 반응의 종류는 입사입자와 표적원자의 질량과 원자번호, 입사입자의 에너지에 따라 다음과 같이 크게 5 가지로 분류할 수 있다.

1. 수 백 eV 정도의 저에너지 영역 또는 입사입자의 질량이 표적원자의 질량보다 훨씬 작을 경우, Cascade는 비등방적이며 표적표면의 기하학적 구조에 따른 보정이 중요하다. 모든 2차 발생 이온들은 최상부 원자층에서 발생하고 입사입자의 진행거리가 수 Å에 불과하기 때문에 표적표면에서 원자수준의 배열을 고려해야 한다.
2. 수 백 eV~5 keV 정도의 저에너지 영역으로서 잘 알려진 Cascade 영역 보다 낮은 에너지 영역으로서 Cascade에서 되튀김 원자로 손실된 에너지는 비등방적이다. 입사입자와 첫 충돌을 일으킨 표적원자는 대부분의 에너지를 흡수하면서 개별적인 방법으로 반응하여 충돌생성 입자가 되어 반복하여 추가적인 충돌생성 원자를 생성한다. 이 영역에서는 수송이론과 이 이론에 기반한 해석적 표현식을 적용할 수 없고 실험 데이터로부터 얻은 경험적 실험곡선을 이용한다.
3. 5 keV~100 keV 정도의 중급 에너지 영역으로서 이 영역에서는 입사이온의 경로를 따라 되튀김 원자의 Cascade가 일어나고, 임의의 점에서 되튀김 원자의 생성 개수는 그 점에서 입사입자가 잃은 에너지에 선형적으로 비례한다. 이 영역에서는 고체의 자유전자에 의한 전자의 제동과 핵에 의한 Coulomb 상호작용 때문에 에너지의 손실이 일어난다. 되튀김 원자에 잃은 에너지는 등방적이고, 이 되튀김 원자는 표적표면에 도달하게 되고 Work 함수에 의한 Potential 장벽을 뛰어 넘어 Sputtering된 원자가 된다. 이 영역에서는 수송이론을 사용하여 되튀김 원자의 개수, 에너지분포 및 각 분포를 결정할 수 있는데, Sputtering 생성량과 분포는 실험치와 잘 일치한다.
4. 500 keV 이상의 고에너지 영역 또는 입자의 질량이 표적원자의 질량보다 대단히 클 경우, 입사입자의 진행경로에 놓여있는 원자가 덩어리로 요동하게 되는 Spike 영역으로서, 입사입자와 충돌하는 표적원자가 충돌로 인한 운동 때문에 다음 원자에 대하여 영향을 미치는 비선형적 효과를 일으키고 따라서 수송이론은 적용되지 않는다.
5. 1 MeV 이상의 초고에너지 영역으로서 이 영역에서는 표적원자의 내부 코어 전자의 이온화에 의한 에너지 손실과 같은 비탄성적 에너지 손실과정을 고려해야 한다. 수송이론을 사용할 수 있으나 보다 더 복잡한 에너지 손실항을 포함하여 수송방정식을 만들어야 한다.

물질 내부를 관통하는 이온들이 산란되고 감속되는 현상에 대한 전산모사는 이온주입, 방사선 손상, Sputtering을 연구하는데 사용되고 있다. 이 전산모사는 Monte Carlo 기법을 사용하는데, 이 기법은 수송방정식으로부터 얻은 해석적인 형태보다 여러 면에서 장점을 갖는다. 탄성충돌을 다룸에 있어서 이 기법은 좀 더 정확할 뿐만 아니라 에너지 및 각도 분포를 쉽게 계산할 수 있게 한다. 특히 입사입자와 재료표면의 거동은 구성원 원자들의 상대질량과 에너지, 재료의 표면구조 등에 따라 크게 다르고, 입사입자가 결정격자에 함입되면서 표적의 구성성분과 표면의 기하학적 구조가 변경되면서 Sputtering 생성율을 변화시킬 수도 있는데, Monte Carlo 기법은 재료의 표면과 재료사이의 접합면을 고려할 수 있도록 한다. Monte Carlo 기법이 갖는 태생적 단점은 통계적 정확도를 만족시키기 위하여 대단히 많은 CPU 시간을 요구한다는 점이나, 근래에 들어서 눈부시게 발전하고 있는 CPU 속도향상에 비추어 보면 이러한 단점은 큰 문제가 되지 않고 있다.

이온이나 중성원자가 재료표면을 때릴 때 일어나는 현상을 모사할 수 있는 전산 코드가 여러 종류 개발되어 있는데 그 중 널리 사용되고 검증된 코드로서 MARLOWE와 TRIM이 있다. 이 두 코드는 모두 입사 및 반사입자의 궤적을 추적하는데 Monte Carlo 기법을 채택하고 있고, 입사이

온과 격자이온 사이의 충돌은 고전적으로 처리한다. 충돌이 발생하는 지점까지는 직선운동을 하고, 진행하는 입자들은 전자와 핵에 의하여 감속된다고 가정한다. MARLOWE는 표적재료의 결정 격자를 상세하게 기술하여 계산하는 반면 TRIM은 결정격자를 평균적으로 기술하여 계산한다. 이 코드를 사용하여 플라즈마가 재료의 표면에 충격을 가할 때 일어나는 전과정에 대한 모형을 구성하는데 필요한 상세한 반사 및 Sputtering 확율을 계산할 수 있고, 이 코드는 중성원자 수송코드에 사용될 수 있도록 정렬된 Data를 생성한다.

TRIM code²⁾의 사용은 입사에너지가 최소 100 eV 이상, 최대 수 MeV 이하로 제한된다. 비정질 또는 다중 격자결정 표적에 충돌하는 입사입자가 핵에 의하여 정지할 때까지 입자의 평균자유경로를 무작위적으로 취하여 충돌지점을 결정하면서 입사입자를 추적하고 충격변수와 산란방위각을 무작위적으로 선택하면서 에너지와 운동량 이전을 고전적으로 계산하는데, 이 때 전 경로를 거쳐 전자에 의한 에너지손실을 차감한다. 이러한 계산과정을 통하여 입사입자와 주 충돌생성 원자에 대한 새로운 속도와 위치를 결정하고, 이들을 다시 새로운 입사입자로 취급하여 계산하여 새로운 세대의 충돌생성 원자를 만들고, 이들 원자들이 격자로부터 탈출하는데 필요한 에너지 이하가 될 때까지 반복하면서 추적한다. 표적표면에 도달하는 초기 입사입자 또는 되튀김 원자에 대해서, 입자의 수직방향 에너지를 표적의 표면 결합에너지와 비교하여 입자가 표면을 이탈할 수 있으면 표면 결합에너지를 차감하고 방출각을 굴절시키고, 에너지가 표면을 이탈할 정도로 크지 않은 경우는 표적내부로 반사시켜 계산을 지속한다.

MARLOWE code³⁾는 다양한 결정구조를 갖는 고체재료에 원자가 충돌해 나가는 과정을 통합적으로 모사할 수 있도록 개발되어 있다. 이 code는 결정격자 내부에서 일어나는 충돌 Cascade에 대하여 고전적인 2 자간 충돌근사법을 사용하여 입사입자의 궤적을 계산하는데, Molière Potential을 이용하여 원자적 산란을 계산하고 충격변수에 따라 변하는 비탄성 충돌 에너지 손실은 Frisov 이론을 사용하여 계산한다. 6 개의 원자간 Potential 에너지함수와 2 개의 비탄성 에너지 손실함수를 포함하고 있고 필요한 경우 사용자가 다른 함수를 정의하여 사용할 수도 있다. 표적원자와 결정표면의 열적 진동도 포함하여 계산할 수 있고, 격자 원자의 영구 변위는 에너지문턱 조건 또는 Frenkel쌍 분리 조건을 이용하여 계산한다. 기타의 계산과정은 TRIM과 유사한 Monte Carlo 기법을 사용하여 계산을 수행한다.

3. 전산모사 결과 및 분석

표적판의 재질은 구리(Cu), SUS304, SUS316으로 그 두께는 5 mm이다. 먼저 각 재질을 구성하고 있는 원자의 전자배치를 살펴보면, Cu 원자는 $[Ar] 3d^{10} 4s^1$, Fe 원자는 $[Ar] 3d^6 4s^2$, Cr 원자는 $[Ar] 3d^5 4s^1$, Ni 원자는 $[Ar] 3d^8 4s^2$, Mo 원자는 $[Kr] 3d^5 4s^1$ 이다. 채집판을 구성하고 있는 원소들의 물성을 표 1에 정리하였다.

표 1. 채집판 구성 원소의 물성

	원자 번호	질량 수	결합 반경 (Å)	원자 반경 (Å)	이온 화 전위 (V)	전기 음성 도	밀도 (g/cc)	융점 (K)	비등점 (K)	기화열 (KJ/mole)	용융열 (KJ/mole)	비열 (J/gK)
Cr	24	51.996	1.18	1.85	6.77	1.66	7.19	2130	2945	344.3	16.9	0.25
Fe	26	55.847	1.17	1.72	7.87	1.83	7.86	1809	3135	349.6	13.8	0.44
Ni	28	58.700	1.15	1.62	7.64	1.91	8.90	1726	3187	370.4	17.47	0.44
Cu	29	63.546	1.17	1.57	7.73	1.90	8.96	1358	2836	300.3	13.05	0.38
Mo	42	95.940	1.30	2.01	7.01	2.16	10.2	2890	4912	598	32	0.25

^{168}Yb 이온이 표적판에 그림 1a와 같이 입사하는 경우, 좌표계의 Z-축은 표적의 두께방향으로 취하였으며, 입사이온의 입사점의 좌표는 $X=Y=Z=0$ 이다. 그림 1b는 ^{168}Yb 이온을 채집하기 위하여 포획효율의 극대화를 고려하여 고안된 채집판이다.

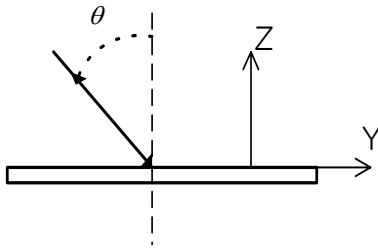


그림 1a. 표적판, 입사이온빔의 입사각, 및 좌표계

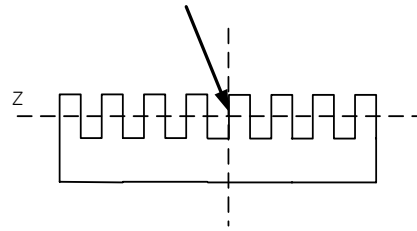


그림 1b. 입사이온 채집판

10 keV의 에너지를 갖는 ^{168}Yb 이온 5000개가 두께 5mm인 표적판에 입사하는 경우, ^{168}Yb 이온들이 이식되는 현상을 전산모사한 결과는 다음과 같다.

입사이온들이 Copper Plate 표적판에 수직으로 입사하는 경우, 입사 ion 1 개 당 6.63 개의 Cu 원자가 sputtering되고, Yb 원자는 그림 2a와 같이 표적판 내부에 implant되고 표적판 표면에서 되튀기거나 표적판을 투과해나가는 Yb 원자는 없다. Copper Plate 표적판에 입사각 30° 로 입사하는 경우, 입사 ion 1 개 당 9.75 개의 Cu 원자가 sputtering되고, Yb 원자는 그림 2b와 같이 표적판 내부에 implant되며 표적판을 투과해나가는 Yb 원자는 없으나 2 개의 Yb이 표면을 되튀어 나간다. Copper Plate 표적판에 입사각 70° 로 입사하는 경우, 입사 ion 1 개 당 29.79 개의 Cu 원자가 sputtering되고, Yb 원자는 그림 2c와 같이 표적판 내부에 implant되며 표적판을 투과해나가는 Yb 원자는 없으나 779 개의 Yb이 표면을 되튀어 나간다.

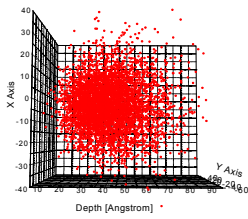


그림 2a. 수직입사(Cu 판)

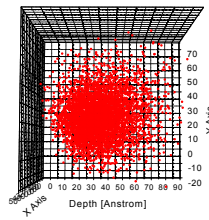


그림 2b. 입사각 30°

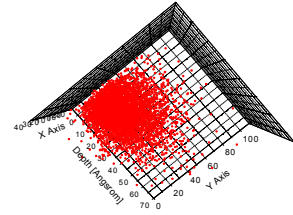


그림 2c. 입사각 70°

입사이온들이 Stainless Steel (SUS 304, Chemical composition: 18% Cr, 74% Fe, 8% Ni) 표적판에 수직으로 입사하는 경우, 입사 ion 1 개 당 sputtering되는 원자는 Cr (0.7554), Fe (3.98), Ni (0.3320) 개이고, Yb 원자는 그림 3a와 같이 표적내부에 implant되고 표적판 표면에서 되튀기거나 표적판을 투과해나가는 Yb 원자는 없다. SUS304 표적판에 30°각을 이루고 입사하는 경우, 입사 ion 1 개 당 sputtering되는 원자는 Cr (1.10), Fe (4.52), Ni (0.4782) 개를 생성하고, Yb 원자는 그림 3b와 같이 표적내부에 implant되며 표적판을 투과해나가는 Yb 원자는 없으나 1 개의 Yb이 표면을 되튀어 나간다. SUS304 표적판에 70°각을 이루고 입사하는 경우, 입사 ion 1 개 당 sputtering되는 원자는 Cr (3.99), Fe (16.2), Ni (1.73) 개를 생성하고, Yb 원자는 그림 3c와 같이 표적판 내부에 implant되며 표적판을 투과해나가는 Yb 원자는 없으나 695 개의 Yb이 표적판 표면을 되튀어 나간다.

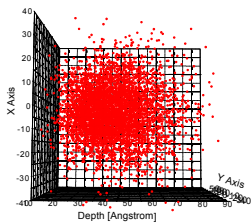


그림 3a. 수직입사(SUS304 판)

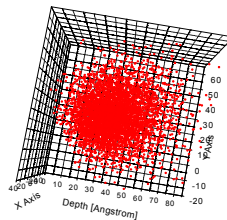


그림 3b. 입사각 30°

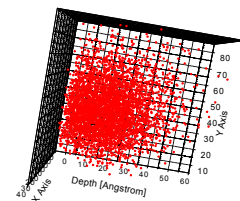


그림 3c. 입사각 70°

입사이온들이 Stainless Steel (SUS 316, Chemical composition: 17% Cr, 68% Fe, 12% Ni, 3% Mo) 표적판에 수직으로 입사하는 경우, 입사 ion 1 개 당 sputtering되는 원자는 Cr (0.5730), Fe (2.270), Ni (0.4062), Mo(0.0896) 개이고, Yb 원자는 그림 4a와 같이 표적판 내부에 implant되고 표적판 표면에서 되튀기거나 표적을 투과해나가는 Yb 원자는 없다. SUS316 표적판에 30°각을 이루고 입사하는 경우, 입사 ion 1 개 당 sputtering되는 원자는 Cr (0.9166), Fe (3.510), Ni (0.6270), Mo(0.1370) 개이고, Yb 원자는 아래 그림 4b와 같이 표적판 내부에 implant되며 표적판을 투과해나가는 Yb 원자는 없으나 2 개의 Yb이 표적판 표면을 되튀어 나간다. SUS316 표적판에 70°각을 이루고 입사하는 경우, 입사 ion 1 개 당 sputtering되는 원자는 Cr (2.23), Fe (8.66),

Ni (1.53), Mo(0.3426) 개이고, Yb 원자는 그림 4c와 같이 표적판 내부에 implant되며 표적판을 투과해나가는 Yb 원자는 없으나 677 개의 Yb이 표적판 표면을 되튀어 나간다.

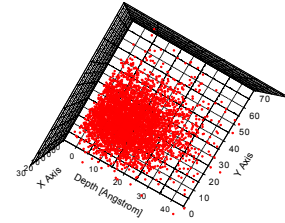
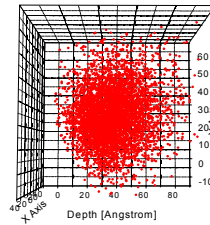
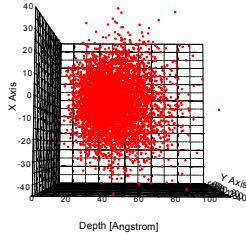


그림 4a. 수직입사(SUS304 판)

그림 4b. 입사각 30°

그림 3c. 입사각 70°

10 keV의 입사 Yb 이온 1 개 당 Sputtering 되는 각 원자의 생성량과 Yb 원자의 되튀김량에 대한 계산결과를 표 2에 정리하였다. 되튀긴 입사이온들의 X-축 방출방향은 입사이온에 대하여 반사되는 각을 유지하는 반면, Y-축 방향의 방출각도는 거의 균질하다. Sputtering 측면에서 채집판 Cu와 SUS를 비교하면 SUS가 Cu에 비하여 sputtering이 적기 때문에 유리하고, SUS316은 SUS304에 비하여 sputtering이 약간 더 적을 뿐만 아니라 되튀긴 Yb 원자가 약간 더 생기기 때문에 채집판으로서 좀 더 유리하다.

표 2. 10 keV Yb이 채집판에 입사하는 경우 Sputtering된 원자와 되튀긴 Yb의 양.

각(°)	Copper 판		SUS 304 판					SUS 316 판					
	Cu	Yb	Fe	Cr	Ni	합	Yb	Fe	Cr	Ni	Mo	합	Yb
0	6.63	0.000	2.98	0.76	0.33	4.07	0.000	2.27	0.57	0.41	0.09	3.34	0.000
30	9.75	0.000	4.62	1.10	0.48	6.20	0.000	3.51	0.92	0.63	0.14	5.20	0.000
70	29.79	0.156	16.20	3.99	1.73	21.92	0.14	13.12	3.32	2.36	0.54	19.34	0.141

10 keV 에너지 Yb 이온 5000 개가 입사각 70°를 갖고 SUS304 채집판에 입사하는 경우, 채집판으로부터 되튀겨 나오는 Yb 원자의 평균에너지는 약 1.26 keV이고, 그 개 수를 에너지 별로 정리하면 그림 5a와 같다. 100 eV 이하의 에너지를 갖는 원자들이 가장 많이 나오나, 전체적인 에너지 스펙트럼은 광범위하다. 약 50 %의 Yb 원자들이 에너지 550 eV 이하에서 분포하고, 약 75%의 Yb 원자들이 에너지 2 keV 이하를 갖는다. 이 경우, 되튀겨 나가는 Yb 원자의 평균 각은 약 50.1°이며, 각도 별 분포도를 살펴보면 그림 5b와 같고, 되튀겨 나오는 Yb 원자들의 분포와 방향 및 에너지를 표시하면 그림 5c, 5d와 같다. Yb 이온/원자들이 60°보다 작은 각으로 입사할 경우에는 에너지에 관계없이 되튀겨 나오는 Yb 원자들의 수는 극히 작다. 따라서 채집판을 평행판으로 구성하고 그 사이에 Yb 이온을 입사시켜 채집판 사이의 다중 Sputtering 효과를 이용하려는 경우, 첫 번째 채집판에서 되튀겨 나온 Yb 원자들이 두 번째 판에 충돌하는데 이들 중 약 70%의 Yb 원자들은 두 번째 판에 이식/주입되는 반면 약 30%는 두 번째 판에서도 되튀긴 Yb 원자를 만들

수 있는 각을 갖는다.

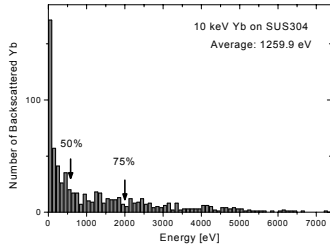


그림 5a. 되튀긴 이온의 에너지분포

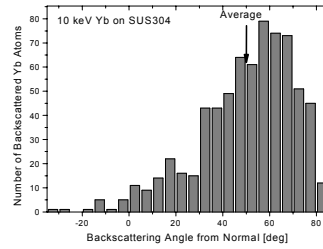


그림 5b. 되튀긴 이온의 각분포

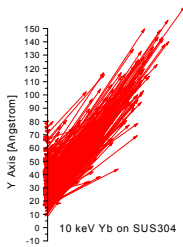


그림 5c. X 축에서 본 되튀긴 이온의 방출

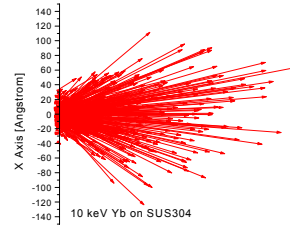


그림 5d. Y 축에서 본 되튀긴 이온의 방출

10 keV 에너지 Yb 이온 5000 개가 입사각 70°를 갖고 SUS316 채집판에 입사하는 경우, 채집판으로부터 되튀겨 나오는 Yb 원자의 평균에너지는 약 1.21 keV이고, 그 개 수를 에너지 별로 정리하면 그림 6a와 같다. 100 eV 이하의 에너지를 갖는 원자들이 가장 많이 나오나, 전체적인 에너지 스펙트럼은 광범위하다. 약 50 %의 Yb 원자들이 에너지 550 eV 이하에서 분포하고, 약 75%의 Yb 원자들이 에너지 1.7 keV 이하를 갖는다. 이 경우, 되튀겨 나가는 Yb 원자의 평균 각은 약 50.1°이며, 각도 별 분포도를 살펴보면 그림 6b와 같고, 되튀겨 나오는 Yb 원자들의 분포와 방향 및 에너지를 표시하면 그림 6c, 6d와 같다.

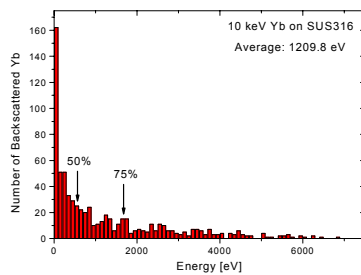


그림 6a. 되튀긴 이온의 에너지분포

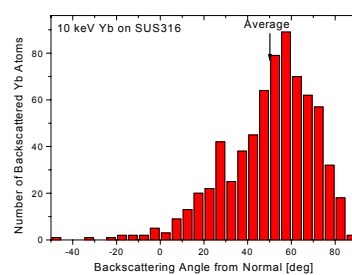


그림 6b. 되튀긴 이온의 각분포

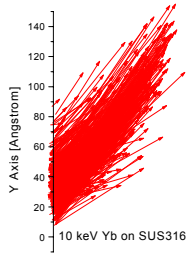


그림 6c. X 축에서 본 되튀긴 이온의 방출

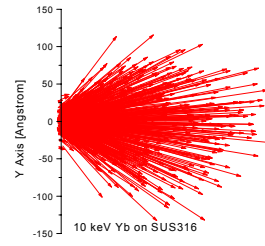


그림 6d. Y 축에서 본 되튀긴 이온의 방출

5 keV 에너지 Yb 이온 5000 개가 입사각 70°를 갖고 SUS304 채집판에 입사하는 경우는, 그림 7a, 7b, 7c, 7d와 같고, SUS316 채집판에 입사하는 경우는 그림 8a, 8b, 8c, 8d와 같다.

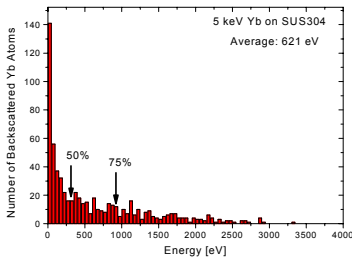


그림 7a. 되튀긴 이온의 에너지분포

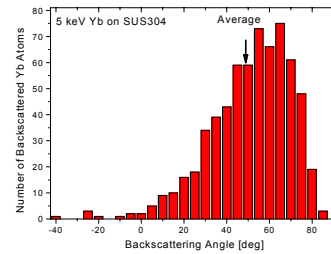


그림 7b. 되튀긴 이온의 각분포

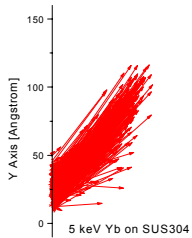


그림 7c. X 축에서 본 되튀긴 이온의 방출

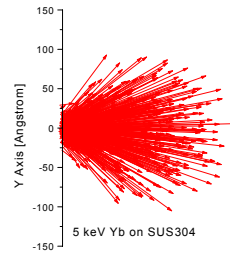


그림 7d. Y 축에서 본 되튀긴 이온의 방출

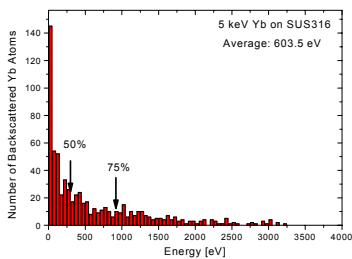


그림 8a. 되튀긴 이온의 에너지분포

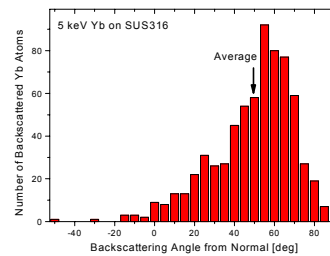


그림 8b. 되튀긴 이온의 각분포

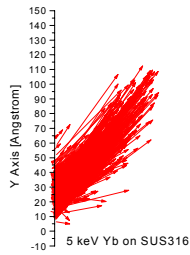


그림 8c. X 축에서 본 되튀긴 이온의 방출

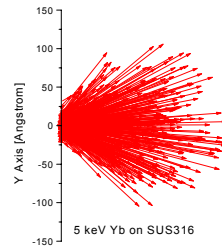


그림 8d. Y 축에서 본 되튀긴 이온의 방출

두께 5mm의 SUS316 평판에 대하여 입사이온 에너지와 입사각을 0.5 keV, 0°에서부터 각각 0.5 keV와 5°씩 증가시키면서 계산한 결과를 정리하면 다음과 같다. 입사각과 입사에너지에 따른 총 sputtering yield는 그림 9a에 표시하였다. 이 그림에서 Sputtering 된 원자의 개수는 입사이온 에너지보다는 입사각에 따라 더 크게 변화함을 알 수 있다. 이러한 현상은 입사이온(Yb)의 질량이 표적원자의 질량보다 대단히 크기 때문에 충돌 후에 입사이온과 표적원자들이 대각도 산란을 하기보다는 입사방향 근방으로 진행할 확율이 더 크기 때문이다. 그러나 작은 각도를 갖고 산란된 표적원자들이 다른 표적원자들과 충돌하게 되면 서로 질량이 비슷하여 대각도 산란을 할 확율이 커지게 되어 거의 모든 에너지와 입사각에 대하여 sputtering된 원자를 발견할 수 있다. 입사각을 20도와 70도로 고정했을 경우, 입사에너지에 따른 단위 입사 이온 당 총 Sputtering된 원자의 개수는 그림 9b에 표시하였는데, 이 그림에서 동일한 입사각인 경우, 큰 입사에너지에서의 충돌은 작은 입사에너지보다 더 깊은 곳에서 일어나므로 진행을 위한 충분한 에너지와 충돌회수를 더 많이 갖게됨을 알 수 있다.

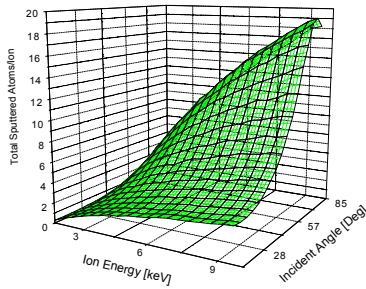


그림 9a. 입사각과 에너지에 따른 sputtering 생성양

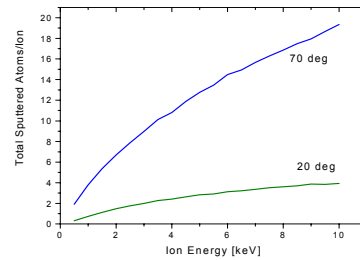


그림 9b. 입사에너지에 따른 sputtering 생성양

입사에너지를 5 keV로 고정했을 경우, 입사각에 따른 단위 입사이온 당 총 Sputtering된 원자 및 개별 구성원자의 개수를 그림 10a에 표시하였다. 이 그림을 보면 동일한 입사에너지에서 입사각의 효과는 좀 더 복잡한 양상을 갖고 있음을 알 수 있다. 작은 입사각 영역에서 입사각이 커질수록 sputtering된 원자의 생성이 천천히 증가하는 것을 볼 수 있는데 이것은 작은 입사각에 따라 표적 깊숙한 곳에서 충돌이 일어나고 큰 질량을 갖는 입사이온 Yb의 진행방향으로 표적원자들이 많이

밀려나기 때문이다. 반면에 어느 정도 큰 입사각에서는 sputtering 원자의 생성이 급격하게 증가하는 것을 보여 주는데 이것은 Yb이 표적표면 근처를 진행하는 시간이 더 길고, 작은 각도이지만 표면 쪽으로 산란되는 Yb들이 표적원자와 충돌하면서 표적원자들을 표면 쪽으로 밀어낼 확률이 더 크기 때문이다. 입사각이 약 75°이상이 되면 sputtering 생성율이 급격히 감소하기 시작하는데, 이것은 표면 쪽으로 산란된 Yb들이 곧 표적표면을 탈출하게되어 표적원자와 충돌할 기회가 줄어들고 그에 따라 표적원자 상호간의 충돌 기회가 줄어들기 때문이다. 입사 에너지와 입사 각도에 따라 되튀겨 나온 Yb 원자의 개수를 그림 10b에 표시하였다. 이 그림을 보면 되튀겨 나오는 Yb 원자 개수는 입사각도에만 의존하고 입사에너지에는 거의 독립적이다. 입사각도가 70°이상에서는 그 값이 급격하게 증가하는데 이것은 입사이온이 표적재료 내부에서 표면 근처를 진행하면서 표적원자와 충돌하고 작은 산란각을 갖더라도 표면적에 대한 상대적 공간산란각은 수직방향으로 입사하는 경우보다 훨씬 더 크기 때문이다. 입사각 80°이상에서는 50%이상의 Yb 원자가 되튀어나온다. 입사에너지가 5 keV일 경우, 입사각에 따른 단위 입사이온 당 되튀겨 나온 Yb 원자의 개수를 그림 10c에 표시하였는데, 이 그림은 입사각 75°부터 되튀겨 나오는 Yb의 수는 급격히 증가함을 보여준다.

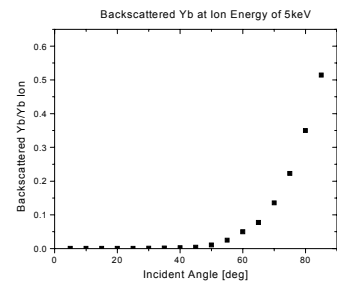
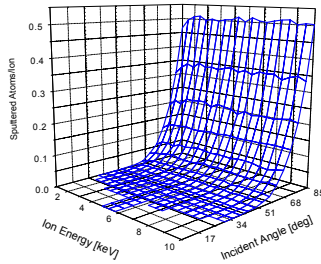
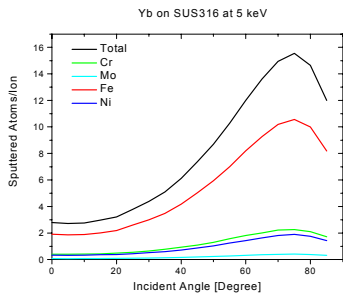


그림 10a. 입사각에 따른 입사이온 당 sputtering 생성양

그림 10b. 되튀긴 Yb 원자수

그림 10c. 되튀긴 Yb 원자수

표적 내부에 이식된 Yb 원자들에 대한 통계적 특성, 즉 평균 depth와 그에 따른 Standard deviation 및 최대치와 최소치를 살펴보면 다음과 같다. Yb 이온 에너지가 0.5 keV일 경우 그림 10a, 10b, 10c에 표시하였고, 에너지 5 keV의 경우는 그림 11a, 11b, 11c에 표시하였다.

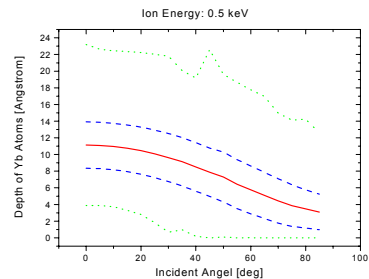
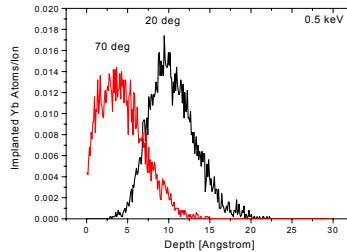
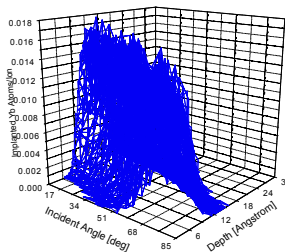


그림 11a. 이식된 Yb의 분포

그림 11b. 이식된 Yb의 분포

그림 11c. 이식된 Yb의 분포범위

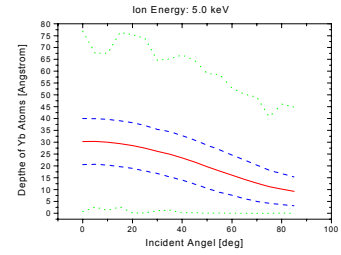
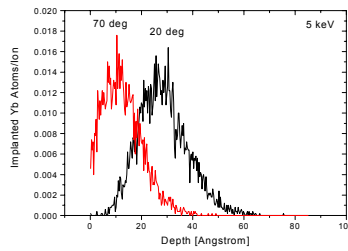
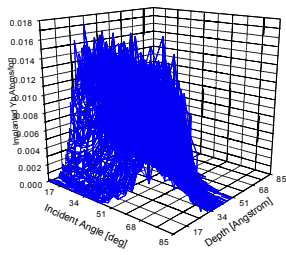


그림 12a. 이식된 Yb의 분포 그림 12b. 이식된 Yb의 분포 그림 12c. 이식된 Yb의 분포범위

4. 결론

X-Z 평면을 따라 이온들이 입사하는 경우, 재료로부터 되튀겨 나오는 입사이온의 X-축 방출각은 통계적인 측면에서 볼 때 입사에 대한 반사의 형태를 갖는 방출각의 특성을 가지나 Y-축 방출각은 균질하고, sputtering되는 원자들은 X- 및 Y-축 방향 모두에서 균질한 각도분포를 갖고 방출되는데, 이러한 점은 입사이온이 무거운 원소이거나 에너지가 클 경우 재료 내부에서 대각도 산란이 작아 충돌 후 진행방향이 어느 정도 유지된다는 점을 의미하는 반면, sputtering된 원자들은 서로 비슷한 질량과 입사이온으로부터 전달받은 에너지가 작기 때문에 거의 양자간 충돌이고 충돌 후 무작위적으로 진행방향이 결정된다는 것을 의미한다.

Yb 이온을 채집판에서 수집하여 화학처리를 통하여 Yb-168 원자를 추출하는 과정에서 추출 효율을 증대시키기 위하여 다음과 같은 점을 고려하여야 한다.

1. 채집판을 구성하는 재료의 물성 및 원자적 성질: 화학적 추출 효율을 높이기 위하여 채집판 표면 가까이 이온들이 이식되는 것이 좋기 때문에 입사에너지는 가능한 낮을수록 좋다. 기화열이 높은 재료가 sputtering을 더 적게 일으키므로 Cu 보다는 Stainless steel (SUS)이 채집판으로서 더 좋으며, SUS304 보다 기화열과 질량이 큰 Mo와 Ni의 함량이 상대적으로 많이 포함된 SUS316이 sputtering을 적게 일으키므로 채집판으로서 더 적합함을 알 수 있다.
2. 채집판의 기하학적 형상: 추출판의 형태는 단면이 빗살 형태로 홈이 파인 판이 표면에서 되튀어 나오는 이온을 효과적으로 포획할 수 있음을 각도를 변화시키면서 수행한 simulation의 결과로부터 알 수 있다. 입사이온들이 채집판 표면에서 되튀어 나오면서 에너지가 감소된 이온을 많이 생성하여 채집판 홈의 맞은 편 부분에서 회수할 수 있도록 입사각을 70도 이상으로 유지하면서 운용하는 것이 효율적이다.
3. 채집판을 구성하는 재료의 화학적 특성: 복합원소로 구성된 재료의 구성 원소와 화학용매 사이의 화학반응도가 크게 다르기 때문에 화학적 특성에 대한 고려가 추출효율을 결정하는데 중요한 역할을 한다. 이식된 Yb 원자들을 화학적 처리를 통하여 추출하기 위하여 이식분포범위를 고려한 화학반응의 동역학적 계산이 요구되고 그 결과에 대한 실험적 검증이 요구된다.

본 연구팀은 이상과 같은 simulation 결과로부터 얻은 가장 최적화된 조건에 기초하여 채집관을 설계 및 제작하고 실험장치에 장착하여 실험을 통하여 검증할 예정이다.

5. 참고문헌

1. 유재권, 외 14 인, 원자분광자료 생산 및 평가기술 개발, KAERI/RR-2355/2002, 대전 (2003)
2. J. P. Biersack and W. Eckstein, Appl. Phys. A34, 73 (1984)
3. M. T. Robinson and I. M. Torrens, Phys. Rev. B9, 5008 (1974)