T1. 열 산화 (Thermal oxidation) — 풀이

A1. 스칼라 복소 진폭에 대한 주어진 방정식계는 매질 경계면의 임의의 점에서 성립해야 한다:

$$\forall y \quad E_y(x=-0) = E_y(x=+0); \quad \begin{cases} E_y(x=-0) = f \cdot e^{-ik_{1y}y}, \ f \neq f(y), \\ E_y(x=+0) = g \cdot e^{-ik_{2y}y}, \ g \neq g(y). \end{cases}$$

이로부터 필연적으로 $k_{1y} = k_{2y}$ 가 따라 나온다. 마찬가지로 두 번째 경계를 고려하면 $k_{2y} = k_{3y}$ 를 얻는다.

A2. k 에 대한 표현과 $k_y = k_{1y} = k_{2y} = k_{3y}$ 의 등식을 이용하여:

$$k = \sqrt{k_{1x}^2 + k_y^2} \ \Rightarrow \ k_{1x} = \sqrt{\frac{\varepsilon_1 \omega^2}{c^2} - k_y^2} = \frac{\sqrt{\varepsilon_1}\,\omega}{c} \cos\theta_1.$$

마찬가지로,

$$k_{2x} = \frac{\sqrt{\varepsilon_2}\,\omega}{c}\cos\theta_2 = \frac{\sqrt{\varepsilon_2}\,\omega}{c}\sqrt{1 - \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2}\sin^2\theta_1}, \quad k_{3x} = \frac{\sqrt{\varepsilon_3}\,\omega}{c}\sqrt{1 - \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_3}\sin^2\theta_1}.$$

$$\boxed{k_{1x} = \frac{\sqrt{\varepsilon_1}\,\omega}{c}\cos\theta_1, \quad k_{2x} = \frac{\omega}{c}\sqrt{\varepsilon_2 - \varepsilon_1\sin^2\theta_1}, \quad k_{3x} = \frac{\omega}{c}\sqrt{\varepsilon_3 - \varepsilon_1\sin^2\theta_1}}$$

A3. $x = 0$ 으로 두고, 경계 1-2 에 대해 E 와 B 의 접선 성분에 대한 경계 조건을 각각 적으면:

$$\mathcal{E} + r\mathcal{E} = a\mathcal{E} + b\mathcal{E}, \qquad k_{1x}\mathcal{E} - k_{1x}\mathcal{E}r = k_{2x}a\mathcal{E} - k_{2x}b\mathcal{E}.$$

경계 2-3 에 대해:

$$a\mathcal{E}e^{ik_{2x}d} + b\mathcal{E}e^{-ik_{2x}d} = t\mathcal{E}, \qquad k_{3x}t\mathcal{E} = k_{2x}\mathcal{E}ae^{ik_{2x}d} - k_{2x}\mathcal{E}be^{-ik_{2x}d}.$$

따라서, $\varphi = k_{2x}d$ 라는 표기를 도입하면 다음 방정식계를 얻는다:

$$\boxed{\begin{cases} 1 + r = a + b, \\ k_{1x}(1 - r) = k_{2x}(a - b), \\ ae^{ik_{2x}d} + be^{-ik_{2x}d} = t, \\ k_{3x}t = k_{2x}(ae^{ik_{2x}d} - be^{-ik_{2x}d}). \end{cases}}$$

A4. A3 으로부터:

$$\begin{cases} t = (ae^{i\varphi} - be^{-i\varphi})\dfrac{k_{2x}}{k_{3x}}, \\ a = be^{-2i\varphi} \cdot \dfrac{k_{2x} + k_{3x}}{k_{2x} - k_{3x}}, \\ a(k_{1x} + k_{2x}) + b(k_{1x} - k_{2x}) = 2k_{1x}, \\ r = \dfrac{a(k_{1x} - k_{2x}) + b(k_{1x} + k_{2x})}{2k_{1x}}. \end{cases}$$

풀면 다음 결과에 이른다:

$$r_s = \frac{(k_{1x} - k_{2x})(k_{2x} + k_{3x}) + (k_{1x} + k_{2x})(k_{2x} - k_{3x})e^{2i\varphi}}{(k_{1x} - k_{2x})(k_{2x} - k_{3x})e^{2i\varphi} + (k_{1x} + k_{2x})(k_{2x} + k_{3x})}.$$

다음 표기를 도입하면

$$\boxed{A = \frac{k_{2x} + k_{3x}}{k_{2x} - k_{3x}}, \qquad B = \frac{k_{1x} + k_{2x}}{k_{1x} - k_{2x}}}$$

요구된 형태로 정리된 표현을 얻는다.

A5. 마찬가지로, EM 파에서 전기장과 자기장의 관계 $\sqrt{\varepsilon}\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}\,E = B$ 를 고려하여 A3 과 같이 두 계면에서의 조건을 적으면:

$$\begin{cases} 1 + r = a + b, \\ \dfrac{k_{1x}}{\varepsilon_1}(1 - r) = \dfrac{k_{2x}}{\varepsilon_2}(a - b), \\ ae^{ik_{2x}d} + be^{-ik_{2x}d} = t, \\ \dfrac{k_{3x}}{\varepsilon_3}t = \dfrac{k_{2x}}{\varepsilon_2}(ae^{ik_{2x}d} - be^{-ik_{2x}d}). \end{cases}$$

즉, 문제에서 제안된 치환을 고려하면:

$$\boxed{\begin{cases} 1 + r = a + b, \\ \kappa_{1x}(1 - r) = \kappa_{2x}(a - b), \\ ae^{i\varphi} + be^{-i\varphi} = t, \\ \kappa_{3x}t = \kappa_{2x}(ae^{i\varphi} - be^{-i\varphi}) \end{cases}}$$

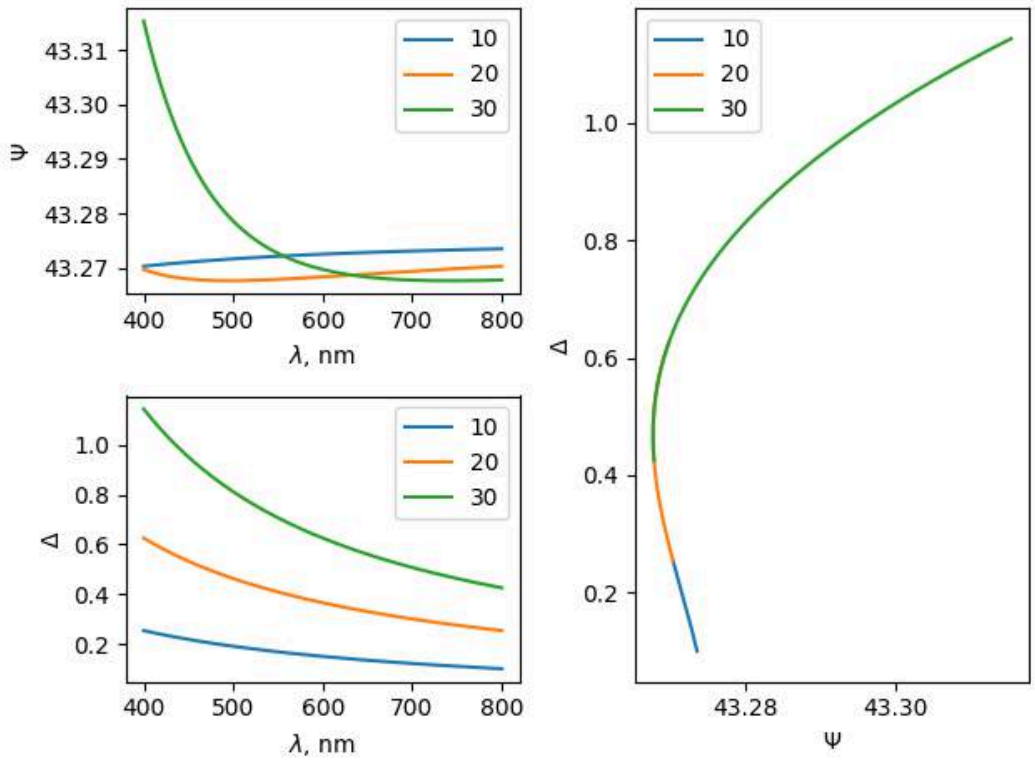
A6. A5 의 방정식계는 $\kappa_{ix} \leftrightarrow k_{ix}$ 의 치환을 통해 A3 의 방정식계와 일치함에 유의하라. 따라서 즉시 답을 적을 수 있다:

$$\boxed{r_p = \frac{A + Be^{2i\varphi}}{AB + e^{2i\varphi}}, \qquad A = \frac{\kappa_{2x} + \kappa_{3x}}{\kappa_{2x} - \kappa_{3x}}, \quad B = \frac{\kappa_{1x} + \kappa_{2x}}{\kappa_{1x} - \kappa_{2x}}}$$

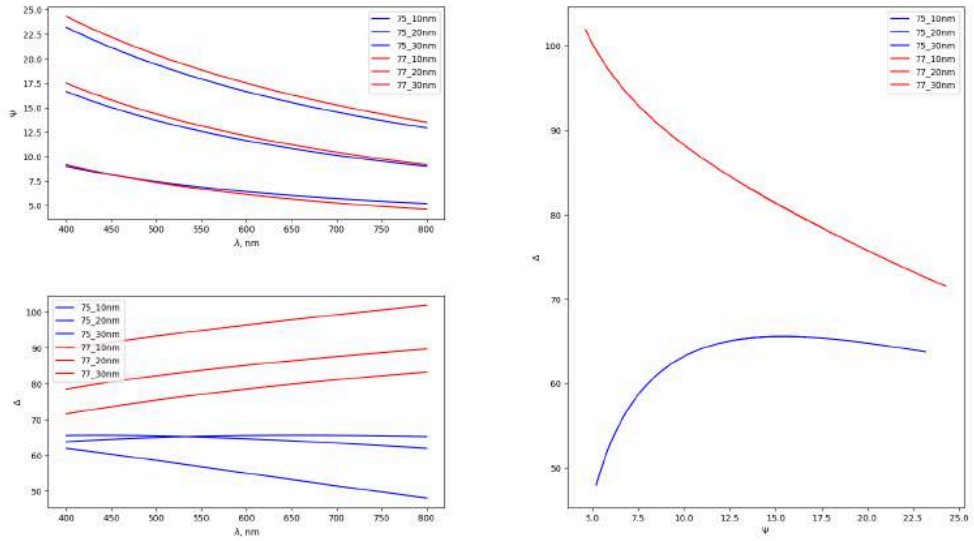
A7. 세 가지 두께 10, 20, 30 nm 에 대한 그래프를 얻는다. 낮은 입사각에서는 Ψ 의 최대 변화 폭이 100 분의 1 도 수준인 반면, $\theta \sim 70^\circ$ 에서는 Ψ 의 최대 변화 폭이 수십 도에 이른다. 최대 민감도는 다음에서 도달한다:

$$\boxed{\theta_{\text{opt}} = 77^\circ}$$

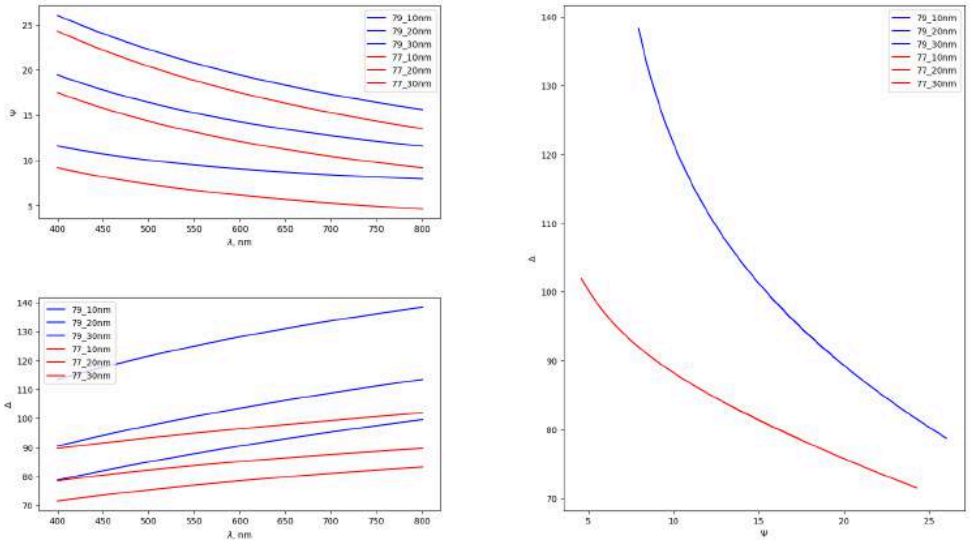
비교를 위한 해당 그래프를 아래에 제시한다.



입사각 20°, 막 두께 *10 nm, 20 nm, 30 nm* 에 대한 의존성.



입사각 75° 와 77°, 막 두께 *10 nm, 20 nm, 30 nm* 에 대한 의존성의 비교.

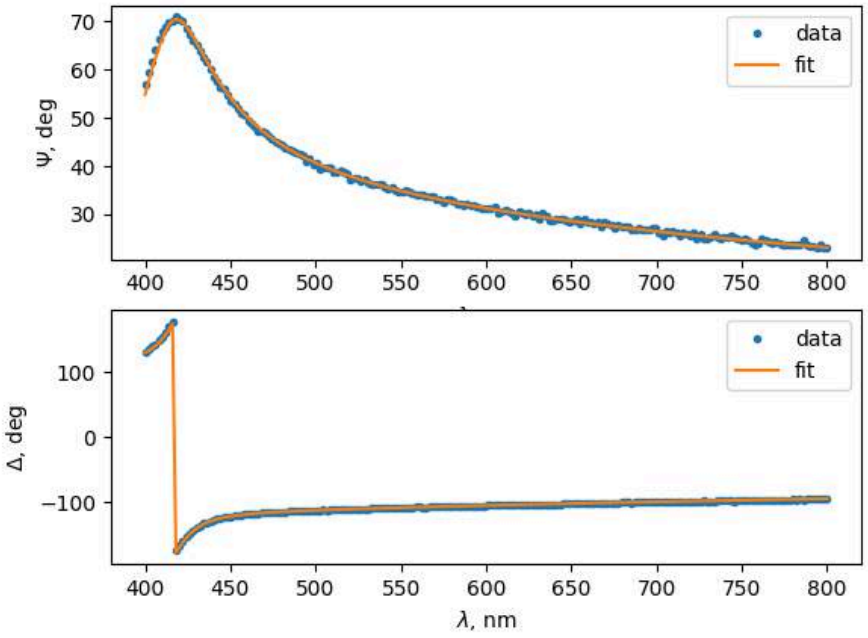


입사각 77° 와 79°, 막 두께 *10 nm, 20 nm, 30 nm* 에 대한 의존성의 비교.

$$\boxed{\theta_{\text{opt}} = 77^\circ}$$

B1. 최적의 Φ 와 d 를 찾는 알고리즘을 설명하자. 먼저 B1.py 에 임의의 Φ 와 d 를 입력한다. 다음으로 각 단계에서 Φ 나 d 를 조금씩 변화시키고, 프로그램 B1.py 가 출력하는 "오차 (error)" 를 살펴본다. 오차가 감소하면 같은 방향으로 Φ 나 d 를 계속 변화시킨다 (예: Φ 를 1° 낮추었을 때 오차가 감소하였다면, 다음 단계에서도 Φ 를 1° 낮춘다). 마침내, 어떤 작은 변화도 오차의 증가를 초래하는 Φ 와 d 에 도달하게 된다. 즉 가능한 최소 오차에 도달하는 것이며, 이는 우리가 최적의 Φ 와 d 를 찾았음을 의미한다.

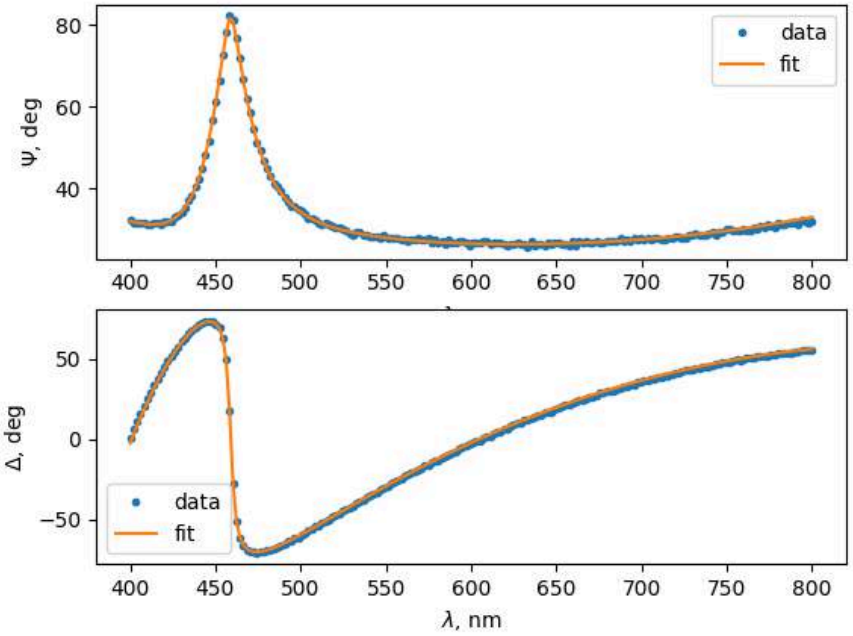
그래프에서 피팅 데이터가 동료의 데이터와 어떻게 일치하는지 볼 수 있지만, 근사 품질의 수치적 매개변수는 프로그램 B1.py 가 출력하는 오차이다.



$\Phi = 71°$, $d = 67\,nm$ 에 대한 그래프.

$\Phi = 71.1°$	$d = 66.7$ nm

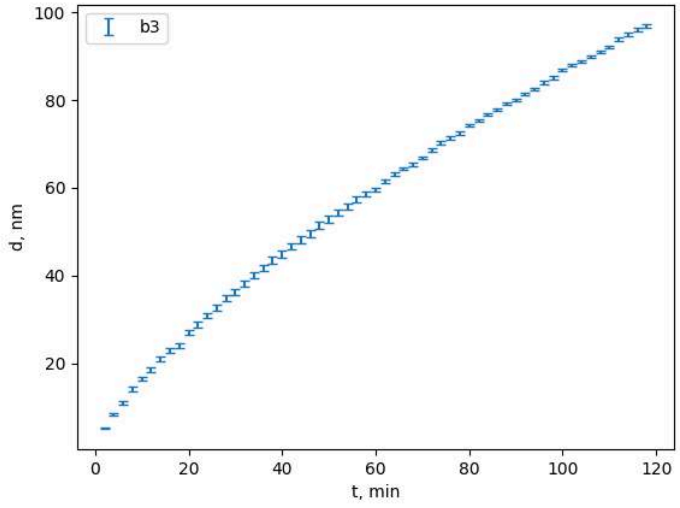
B2. 최적의 Φ 와 d 를 찾는 알고리즘은 파트 B1 의 것과 일치한다.



$\Phi = 57°$, $d = 232\,nm$ 에 대한 그래프.

$\Phi = 57°$	$d = 232$ nm

B3. B_in.txt 에 name = b3, Phi = 77, $T = 1000$, tmax = 120 으로 설정한 후 gen_data.exe 와 B.py 를 순차적으로 실행한다. "res" 폴더에서 원하는 그래프가 담긴 파일을 얻는다. 실험의 품질을 높이기 위해 A7 에서 얻은 $\Phi = \theta_{\text{opt}}$ 를 대입함에 유의하라.



B4. 작은 시간 구간 Δt 와 면적 S 인 SiO_2-Si 경계의 일부를 고려하자. 그러면 Δt 동안 산화된 Si 의 질량은 $\Delta m = F_3 \Delta t\, S\, \mu_{SiO_2}$ 이다. 한편, SiO_2-Si 경계는 $v\Delta t$ 만큼 이동하므로 생성된 SiO_2 의 질량은 $\Delta m = \rho_{SiO_2} S\, v \Delta t$ 이다. 따라서 $\rho_{SiO_2} v\, S \Delta t = F_3 \Delta t\, S\, \mu_{SiO_2}$ 이고, $\rho_{SiO_2} v = F_3 \mu_{SiO_2}$ 이다.

$$\boxed{v = F_3 \frac{\mu_{SiO_2}}{\rho_{SiO_2}}}$$

B5. 정상 조건으로부터 $F_1 = F_2 = F_3$, 즉 $h(C^* - C_0) = \dfrac{D}{d}(C_0 - C_i) = kC_i$ 이다. 두 번째 등식에서 $C_0 = (1 + \frac{kd}{D})C_i$ 를 얻는다. 이를 $h(C^* - C_0) = kC_i$ 에 대입하면 $h(C^* - (1 + \frac{kd}{D})C_i) = kC_i$, 즉 $C^* = (\frac{k}{h} + \frac{kd}{D} + 1)C_i$ 가 되어

$$\boxed{C_0 = C^* \frac{1 + \dfrac{kd}{D}}{1 + \dfrac{k}{h} + \dfrac{kd}{D}}, \qquad C_i = C^* \frac{1}{1 + \dfrac{k}{h} + \dfrac{kd}{D}}}$$

B6. B4 로부터 $v = \dot{d} = \dfrac{F_3 \mu_{SiO_2}}{\rho_{SiO_2}} = \dfrac{kC_i \mu_{SiO_2}}{\rho_{SiO_2}}$ 이다. B5 에서 얻은 C_i 의 표현을 고려하면

$$\dot{d} = \frac{C^* \mu_{SiO_2}}{\rho_{SiO_2}} \cdot \frac{1}{\frac{1}{k} + \frac{1}{h} + \frac{d}{D}}$$

또는 동등하게,

$$\frac{\dot{d} \cdot d}{D} + \dot{d} \cdot \left(\frac{1}{k} + \frac{1}{h}\right) - \frac{C^* \mu_{SiO_2}}{\rho_{SiO_2}} = 0.$$

좌변은 다음과 같음에 유의하라:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{d^2}{2D} + d \cdot \left(\frac{1}{k} + \frac{1}{h}\right) - t \cdot \frac{C^* \mu_{SiO_2}}{\rho_{SiO_2}}\right) = 0$$

따라서

$$\frac{d^2}{2D} + d \cdot \left(\frac{1}{k} + \frac{1}{h}\right) - t \cdot \frac{C^* \mu_{SiO_2}}{\rho_{SiO_2}} = \text{const}$$

여기서 const 는 초기 조건 $d(t_0) = d_0$ 로부터 구할 수 있다. 즉,

$$\text{const} = \frac{d_0^2}{2D} + d_0 \cdot \left(\frac{1}{k} + \frac{1}{h}\right) - t_0 \cdot \frac{C^* \mu_{SiO_2}}{\rho_{SiO_2}}$$

그러므로

$$d^2 + 2D \cdot \left(\frac{1}{k} + \frac{1}{h}\right) \cdot d = \frac{2DC^* \mu_{SiO_2}}{\rho_{SiO_2}}(t + \tau)$$

여기서 $\tau = \dfrac{\text{const} \cdot \rho_{SiO_2}}{2DC^* \mu_{SiO_2}}$ 이다.

$$\boxed{A = 2D\left(\frac{1}{k} + \frac{1}{h}\right), \qquad B = 2DC^* \frac{\mu_{SiO_2}}{\rho_{SiO_2}}}$$

B7. 먼저 B7.py 에 필요한 데이터를 생성한다. B_in.txt 에 T, $\Phi = \theta_{\text{opt}} = 77°$, tmax $= 120$ 으로 설정한 후 gen_data.exe 와 B.py 를 실행하고, 마지막으로 B7.py 를 다섯 번 실행하면서 매번 B_in.txt 의 name, T, Φ 를 입력한다. B7.py 의 각 출력을 파일 B8_in.txt 에 기록하면 아래 표를 얻는다.

$T = 850\,°\text{C}$ 에서도 "Final layer is too thin to approximate" 오류가 발생하고, $T = 900\,°\text{C}$ 에서는 오차율이 너무 높으므로, $T = 950\,°\text{C}$ 부터 $50\,°\text{C}$ 간격으로 시작하는 것이 합리적임에 유의하라.

T,°C	B, nm^2/min	ΔB, nm^2/min	B/A, nm/min	$\Delta(B/A)$, nm/min
950	85	6	0.780	0.044
1000	160	6	1.017	0.027
1050	251	4	2.310	0.044
1100	389	2	4.636	0.070
1150	551	4	7.751	0.188

B8. 먼저 프로그램 B8.py 를 이용하여 그래프 $\ln B\left(\frac{1}{T}\right)$ 와 $\ln \frac{B}{A}\left(\frac{1}{T}\right)$ 를 그린다. 콘솔에서 제안된 선형 근사의 기울기를 볼 수 있다. 즉, $\ln B\left(\frac{1}{T}\right)$ 의 기울기 계수는 $-(14671 \pm 625)\,\text{K}$ 이고, $\ln \frac{B}{A}\left(\frac{1}{T}\right)$ 의 기울기 계수는 $-(23418 \pm 1730)\,\text{K}$ 이다 (여기서 K 는 1 켈빈을 의미).

B6 으로부터 다음을 얻는다:

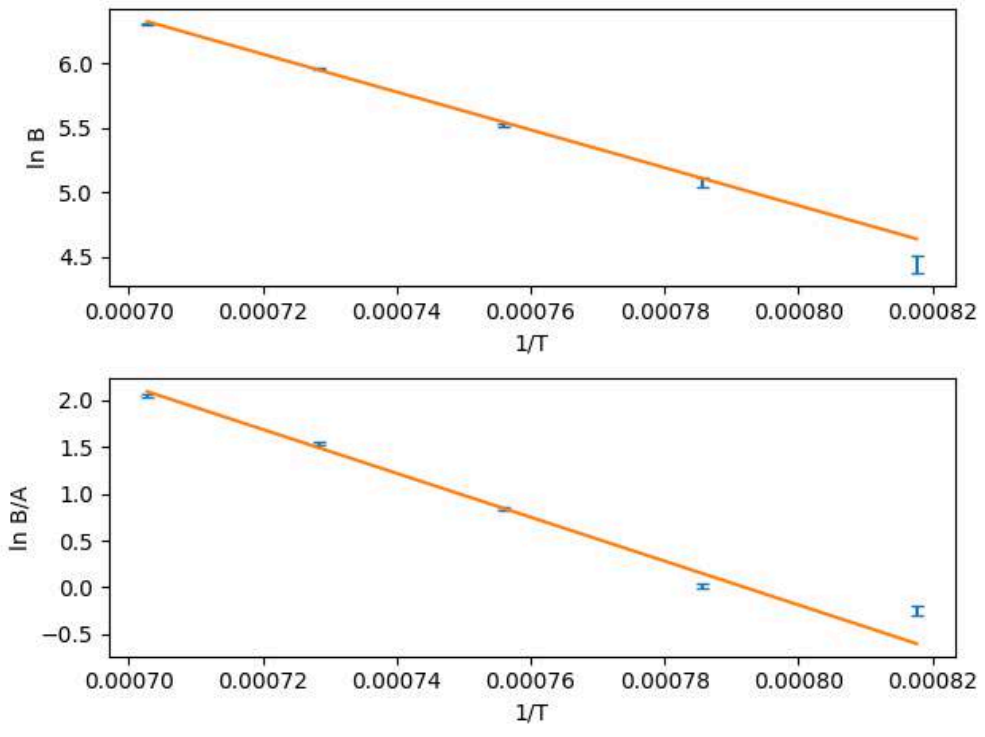
$$B = 2DC^* \frac{\mu_{\text{SiO}_2}}{\rho_{\text{SiO}_2}} \propto e^{-\frac{\Delta E_a}{k_B T}}$$

따라서 그래프 $\ln B\left(\frac{1}{T}\right)$ 의 기울기 계수는 $-\dfrac{\Delta E_a}{k_B}$ 와 같다. 그러므로 $\Delta E_a = (2.208 \pm 0.086) \cdot 10^{-19}\,\text{J}$, 또는 동등하게,

$$\Delta E_a = \frac{(2.208 \pm 0.086) \cdot 10^{-19}}{1.60 \cdot 10^{-19}}\ \text{eV} = (1.38 \pm 0.05)\ \text{eV}$$

다음으로, $h \gg k$ 이면 $A \approx \dfrac{2D}{k}$ 이므로,

$$\frac{B}{A} \approx kC^* \frac{\mu_{\text{SiO}_2}}{\rho_{\text{SiO}_2}} \propto e^{-\frac{\Delta E_b}{k_B T}}$$



그래프 $\ln \frac{B}{A}\left(\frac{1}{T}\right)$ 의 기울기 계수는 $-\dfrac{\Delta E_b}{k_B}$ 와 같다. 그러므로 $\Delta E_b = (3.23 \pm 0.23) \cdot 10^{-19}\,\mathrm{J}$, 또는 동등하게,

$$\Delta E_b = \frac{(3.23 \pm 0.23) \cdot 10^{-19}}{1.60 \cdot 10^{-19}}\ \mathrm{eV} = (2.02 \pm 0.14)\ \mathrm{eV}$$

$$\boxed{\Delta E_a = (1.38 \pm 0.05)\ \mathrm{eV}, \qquad \Delta E_b = (2.02 \pm 0.14)\ \mathrm{eV}}$$