

e^- -CF₄산란의 전자이동속도 및 특성에너지 연구

Electron Swarm Drift Velocity and Characteristic Energy
in e^- -CF₄ Scattering

임상원*	동국대학교 전기공학과
유희영	대림전문대 전자공학과
김상남	시립인천전문대 전기공학과
하성철	동국대학교 전기공학과

Sang-Won Lim*	Dept. of Electrical Eng., Dongguk University
Heoi-Young Yu	Dept. of Electronic Eng., Daelim Junior College
Sang-Nam Kim	Dept. of Electrical Eng., Inchon Junior College
Sung-Chul Ha	Dept. of Electrical Eng., Dongguk University

Abstract

In this paper, the electron transport characteristic in CF₄ has been analysed over the E/N range 1~300(Td) by a two-term approximation Boltzmann equation method and by a Monte Carlo simulation. The alteration of cross sections from the literature is avoided as much as possible in the analysis. The motion has been calculated to give swarm parameters for the electron drift velocity(W), diffusion coefficient(D_L), the ratio of the diffusion coefficient to the mobility(D_L/μ), mean energy($\bar{\epsilon}$), the electron energy distribution function.

The electron energy distribution function has been analysed in CF₄ at E/N=50, 100 and 200(Td) for a case of the equilibrium region in the mean electron energy. The results of Boltzmann equation and Monte Carlo simulation have been compared with experimental data by Y. Nakamura and M. Hayashi.

1. 서론

전계가 인가되고 있는 전극간의 기체방전공간에서 음극으로부터 방출된 전자는 전계에 의한 궤도비행과 전자와 분자의 충돌에 의해서 전자에너지분포가 변화하며 최후에는 일정한 에너지분포를 이루는 공간을 형성한다.

CF₄(Tetrafluoromethane)가스는 할로젠 원소를 함유하며 전극등 고체표면에 흡착하기쉬운성질과 전자부착성 때문에 대체로 높은 절연내력을 가지고 있으며 한편으로 방전공간에서 전계에 의한 하전입자의 활성화가 존재한다. 또한 비탄성충돌에 의하여 전자에너지가 감소하여 절연내력이 향상되고 냉각효과도 크다.¹⁾ 이와같은 전자부착특성은 가스방전 스위치에 이용되고 있는 중요한 기체이며 최근에는 반도체 프라즈마 건식식각(dry etching)에 사용된다.^{2,3)} 그리고 CF₄가스의 운동량변환단면적은 전자에너지가 0.1~0.4(eV) 부근에 Ramsauer minimum을 가지고 있기 때문에 큰 진동여기충돌효과로 높은 E/N 영역에서 전자이동속도가 상승하고 이동도의 부구배(NDC : Negative Differential Conductivity) 특성을 나타내고 있다.⁴⁾

또한 CF₄가스에 대한 연구에서는 전자수송계수 즉 전자이동속도, 확산계수, 전리, 부착, 실효전

리계수, 전자특성에너지, 평균에너지 및 전자에너지 분포함수에 관한 정확하고 상세한 지식이 요구되며 이와같은 전자수송특성을 해석하기 위해서는 정확한 운동량 변환단면적, 여기단면적, 전리 및 부착단면적 등이 필요하고 이들의 값을 이용하여 전자군파라미터의 특성을 볼츠만 방정식(Boltzmann equation)과 몬테칼로 시뮬레이션(MCS)에 의해서 구하여지고 있다.^{5,6)}

볼츠만 방정식은 MCS와는 다르게 개개의 전자를 추적하지 않고 처음부터 다수의 입자를 포함하는 전자류를 취급하기 위하여 충돌의 확률적 성질을 기초로 하여, 전자군의 연속적인 예측이 가능하고 계산시간이 비교적 짧아 각종 전자군 파라미터를 산출하는데 일반적으로 사용되어 왔다.

또한 컴퓨터의 계산성능이 향상됨에 따라 방전 공간내에서 난수를 이용하여 각종 파라미터의 위치적 변동에 의해서 전자의 평균에너지와 전자밀도 및 시간의 함수로서 추적하여 해석하는 몬테칼로 시뮬레이션(MCS)은 현재 많은 연구자들에 의해 이용되고 있다. 몬테칼로 법은 전자사태에서 나타나는 개개의 전자를 추적하여 방전 파라미터의 동향을 조사하여 이들 전자의 물리량을 가상적으로 샘플링하고 그들의 운동을 컴퓨터로 분석하여 전자군의 파라미터의 값을 확률적으로 결정하는 것이다.⁷⁾

본 연구에서는 e^- -CF₄기체의 전기전도특성을 나타내는 전하이동속도(W), 전자의 확산계수(NDL), 전자의 특성에너지(D_L/μ), 전자에너지 분포함수 및 평균에너지 등의 전자군 파라미터를 E/N(Td) : 1~300(Td) (E : 전계, N : 기체 분자수밀도, 1Td=1×10⁻¹⁷V·cm², N : 3.5353×10¹⁶cm⁻³ 0°C 1Torr에 해당)의 범위에서 비등방성 산란을 고려한 몬테칼로 시뮬레이션과 볼츠만방정식의 Backward prolongation법에 의해서 계산, 해석하고 그 결과를 Y. Nakamura⁹⁾, M. Hayashi¹⁰⁾의 실험치 및 계산치와 비교 검토하여 이용한 충돌단면적의 타당성을 입증한다. 그리고 전하이동속도의 변화에 따른 부구배와 전기전도 특성의 영향을 고찰한다.

2. 시뮬레이션 방법

먼저 시뮬레이션 전체의 개략적인 흐름을 그림1에 나타내었다.

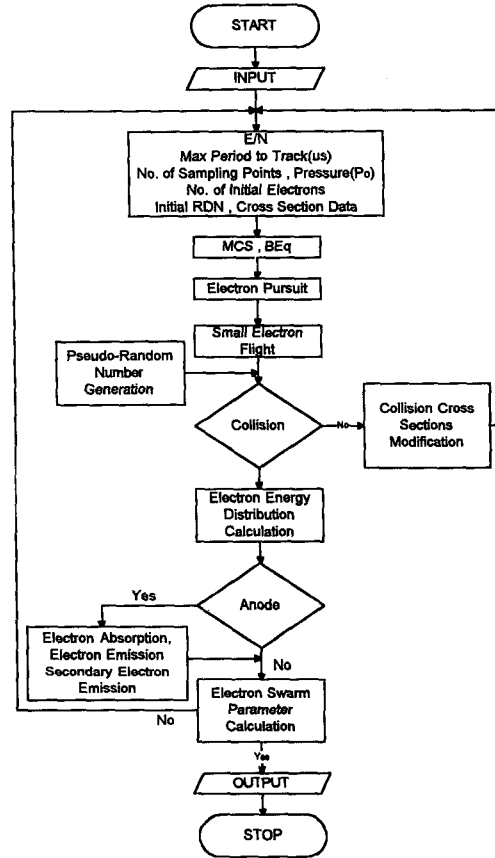


그림 1. 전자 시뮬레이션 흐름도.

Fig 1. Flowchart of the electron simulation.

전자군 수송특성의 기본계산식은 기체방전 시뮬레이션 기법을 이용하였다.⁶⁾ 따라서 최초에 전계분포, 기체수밀도, 초기 전극간분할(Sampling points : 20), 전자수(수 1000정도) 및 1초간의 추적시간 등의 초기값을 입력한다. 전자는 1회 비행으로 Δt(0.1μs)사이를 추적하여 충돌의 유무를 판정한다. Δt의 값은 전자의 평균에너지를 갖는 미소비행거리(Δℓ)사이에서 충돌하는 확률은 평균자유행정(λ)의 1/10으로 계산하였다.⁸⁾ 그리고 전자의 이동속도, 충돌의 종류, 충돌후의 비행방향을 시뮬레이션 한다.

본 시뮬레이션에서는 전계분포에 대응하는 전극간의 분해거리, 위치를 분해한 Sample, 그때 전자가 도달하는 시간(Time), 전자의 종방향 거리(R*R), 전자의 횡방향 거리(DLT) 및 그점의 전자에너지등과 전자궤도에서 전리가 일어난 경우

에 2차전자(NN), 난수(Random Number : 13) 등을 양극에 도달할때까지 반복 추적하여 Sparc Workstation(SS-20)을 이용하여 시뮬레이션하였다. 그리고 볼츠만 방정식의 Backward Prolongation을 이용하여 $f(\epsilon)$ 의 에너지 분포함수를 수렴한 값으로부터 각 전자수송계수를 계산하였다.

3. 전자의 충돌단면적

본 연구의 시뮬레이션에 이용한 CF_4 의 전자 충돌단면적은 Y. Nakamura(1988)의 Set⁹⁾을 사용하였으며 그림2에 나타내었다.

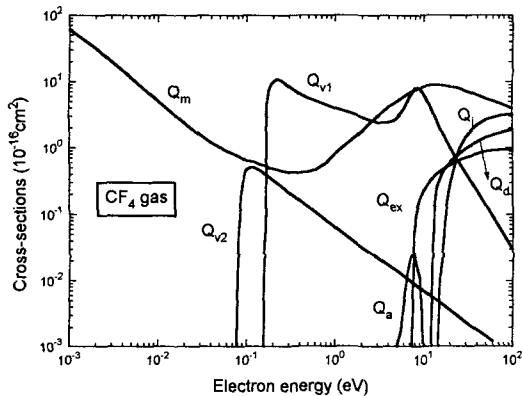


그림 2. CF_4 가스의 전자충돌단면적.

Fig 2. The collision cross sections of electrons in CF_4 gas.

이 CF_4 의 전자 충돌단면적은 운동량 변환단면적(Q_m)의 0.1~0.4 eV 범위에서 Ramsauer minimum을 가지며 큰 진동 여기단면적(Q_{v1}), Q_{v2} 의 threshold 에너지의 값은 0.18(eV), 0.08(eV)이며 전자 부착단면적(Q_a)의 threshold 에너지의 값은 5(eV)이다. 전자여기(Q_{ex})의 threshold 에너지(약 7.5eV) 부근에 비교적 큰 부착단면적을 가지고 이것이 전자부성특성을 나타내는 원인이 된다. 그리고 해리단면적(Q_d), 전리단면적(Q_i)등으로 구성되어 있고 이들의 값을 이용하여 계산하였다.

4. 시뮬레이션 결과 및 고찰

순수 CF_4 가스의 전자수송 Parameter의 결과를

몬테칼로 시뮬레이션과 볼츠만방정식을 통하여 고찰하였다.

그림3의 전자기동속도(W)는 E/N : 1~300(Td) 범위에서 Y. Nakamura(1988)⁹⁾, M. Hayashi(1986)¹⁰⁾의 실측치와 MCS, BEq를 비교하였다.

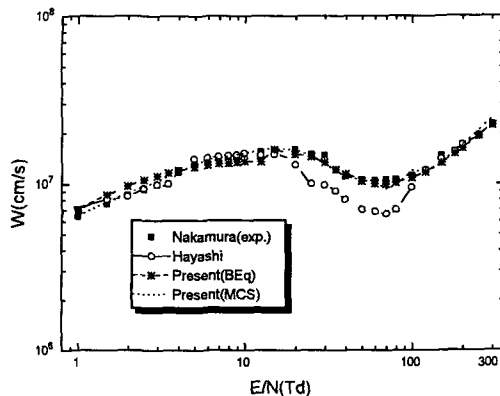


그림 3. CF_4 가스중에서의 전자기동속도.

Fig 3. The drift velocity of electrons in CF_4 gas.

CF_4 가스의 운동량변환단면적은 0.1~0.4(eV) 부근에 넓은 Ramsauer minimum과 여기에 커다란 진동 여기단면적을 가짐으로써 진동여기충돌에 의해서 낮은 에너지대의 전자가 많기 때문에 전자에너지의 커다란 순환이 발생하고 완화시간의 감소효과로 E/N : 70~300(Td)영역에서 drift속도는 상승되며 이동도에 부구배(NDC: Negative Differential Conductivity)의 특성을 나타내었다.

본 연구에서 MCS와 BEq로 계산된 이동속도는 거의 일치하였고 E/N : 20~100(Td) 범위에서는 Y. Nakamura와 M. Hayashi의 실험치는 큰 차이가 나타났다. 이것은 CF_4 가스가 갖는 큰 진동 여기단면적과 운동량 변환단면적의 작용으로 나타나는 에너지분포의 비등방성에 의한 2항근사 해석의 오차와 전자부성특성이 현저한 영역에서 drift 속도의 측정방법과 해석의 문제로 인하여 오차가 발생된다고 생각된다.

그림4의 확산계수는 가스분자수 밀도(N)와의 곱 ND_L 을 E/N(Td)의 함수로 나타내었다.

본 연구에서는 Y. Nakamura의 전자 충돌단면적을 이용하여 MCS와 BEq으로 계산한 ND_L 의 결과와 비교하고 Y.Nakamura⁹⁾와 M.Hayashi¹⁰⁾의 실측치를 나타내었다.

여기에서 계산된 결과는 넓은 E/N(Td)범위에서 실측치와 상당한 차이가 나타나고 있다. Y. Nakamura의 단면적을 이용하여 MCS에 의해

계산된 값은 약 $E/N=35(\text{Td})$ 에서 실측치보다도 $1.4 \times 10^{23} [\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}]$ 정도 차이가 나며 이는 진동 여기 단면적(Q_{v1})의 공명 peak가 작기 때문으로 생각된다. 또한 ND_L 은 $E/N(\text{Td})$ 의 증가에 따른 의존성이 크게 작용하고 있음을 알 수 있다.

CF_4 가스중의 전자 확산계수는 이동속도, 전리 및 부착계수의 영향으로 하전입자 밀도의 공간적구배와 전계가 공전하는 공간내에서 하전입자의 거시적운동이 일어나고 비평형상태의 전자에너지 분포의 비등방성이 나타난 것으로 생각된다.

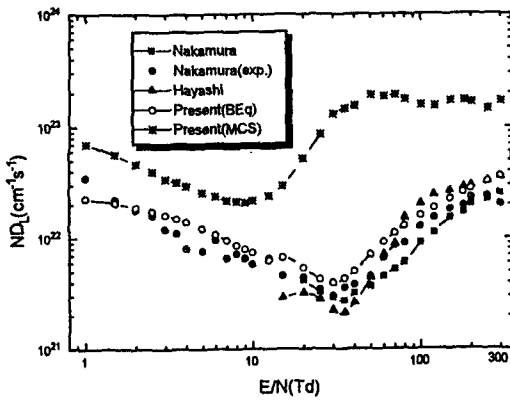


그림 4. CF_4 가스중에서의 확산계수.
Fig 4. The diffusion coefficients in CF_4 gas.

전자의 평균에너지($\bar{\epsilon}$)는 평행평균 전극간거리(cm), $E/N(\text{Td})$ 및 초기전자수(수천개)를 parameter로하여 MCS법으로 전자를 추적한 값을 그림5에 나타내었다.

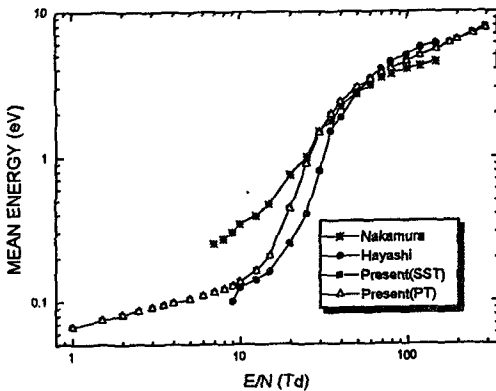


그림 5. CF_4 가스중에서의 전자의 평균에너지.
Fig 5. The mean energy of electrons in CF_4 gas.

전자의 평균에너지는 전극간거리 및 시간의 함수로써 계산되는 전자에너지분포, 전자이동속도에 관계되는 물리량이다. 따라서 음극면에서의 전자의 평균에너지는 비탄성충돌이 일어날 때까지는 거의 일정한 에너지상태를 나타냈으며 $E/N=10(\text{Td})$ 범위에서부터 수직으로 증가하여 비평형 상태로 나타났다. 이것은 음극에서 2차전자가 방출하므로 양극에서 전자를 모두 흡수하기 때문이라고 생각된다.

그림6은 확산계수와 이동도의 비 즉 특성에너지(D_L/μ)를 $E/N : 1 \sim 300(\text{Td})$ 변화에 따라 볼츠만 방정식(BEq)의 2항근사식을 이용한 모의실험 값을 나타낸 것이다.

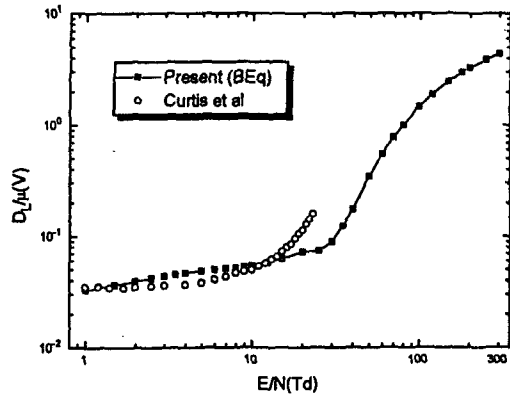


그림 6. CF_4 가스중에서의 특성에너지.
Fig 6. The characteristic energy in CF_4 gas.

그림에 나타난 바와같이 $E/N : 1 \sim 10.5(\text{Td})$ 영역에서는 Curtis et al.¹¹⁾의 측정값과 거의 일치하였고 $E/N : 10.5 \sim 300(\text{Td})$ 에서는 $D_L/\mu(\text{V})$ 값이 증가하였다. 이것은 여기충돌에 의한 drift 속도의 상승과 전리충돌에 의한 전자수 보존상태의 영향을 받는 것으로 생각된다.

그림7,8,9에서는 전자이동속도(W)와 특성에너지(D_L/μ), 즉 전자 swarm parameter에 직접 관련되는 물리량인 전자에너지분포($f(\epsilon)$)를 $E/N = 50, 100, 200(\text{Td})$ 에 대하여 나타내었다. 전자가 전계에 의하여 운동할 때 Sample(16, 7, 12), 거리(1, 0.5, 0.8cm), 평균에너지(2.8, 4.5, 6.4eV) 범위에서 MCS법으로 전자를 추적하여 나타난 전자에너지분포 $f(\epsilon)$ 는 BEq와 SST의 계산값과 전반적으로 큰 차이를 나타내었다.

$f(\epsilon)$ 의 초기값에서는 전자에너지분포가 증가하고 그 이상의 전자에너지는 감소하는 경향이 나

타났다. 이와같은 현상은 CF_4 가스의 진동 여기 충돌과 진동 여기단면적의 공명효과 때문에 나타나는 것으로 생각되고 $E/N(Td)$ 영역에서는 전자여기나 전리 등의 비탄성충돌로 급격히 감소되어 나타나는 현상으로서 민감한 반응으로 여겨진다.

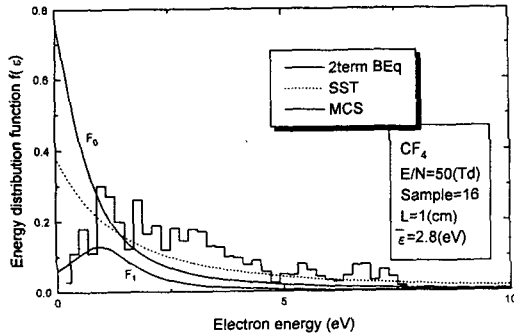


그림 7. CF_4 가스중에서의 전자에너지 분포함수.

Fig 7. The energy distribution function of electrons in CF_4 gas.

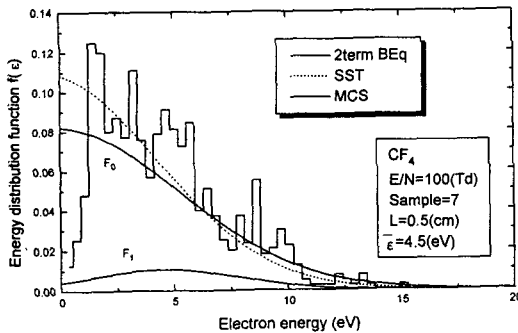


그림 8. CF_4 가스중에서의 전자에너지 분포함수.

Fig 8. The energy distribution function of electrons in CF_4 gas.

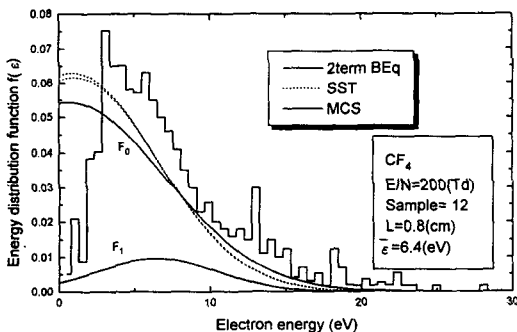


그림 9. CF_4 가스중에서의 전자에너지 분포함수.

Fig 9. The energy distribution function of electrons in CF_4 gas.

5. 결론

e^-CF_4 기체중에서의 전자군의 전자기동속도 (W)와 특성에너지(D_L/μ)를 MCS와 BEq를 이용하여 해석한 결과 다음과 같은 결론을 얻었다.

1. e^-CF_4 기체중에서 전자기동속도(W)의 전체적인 변화는 상대전계의 세기 $E/N : 1\sim 10(Td)$ 영역에서는 실측치와 일치하였으나 $E/N : 40\sim 100(Td)$ 영역에서는 감소되는 부구배[負勾配](NDC : Negative Differential Conductivity)로 인한 전자부성특성이 나타났다. 그리고 $E/N : 100\sim 300(Td)$ 영역에서는 전자기동속도가 증가함에 따라 전기전도특성이 향상된다는 결론을 얻을 수 있었다.
2. 전자의 평균에너지($\bar{\epsilon}$), 확산계수(D_L)와 이동도(μ)의 비인 전자특성에너지(D_L/μ)를 구하였고 $E/N : 10.5\sim 300(Td)$ 영역에서는 급격한 증가를 나타내었다. 따라서 E/N 이 10.5(Td)이상 영역에서는 여기와 전리충돌의 반응으로 비탄성충돌작용이 일어나고 있음을 예측할 수 있다.
3. $E/N : 50, 100, 200(Td)$ 에 대한 전자에너지분포는 MCS, BEq, SST로 해석한 계산치가 전자여기나 전리 등의 비탄성충돌과 진동 여기단면적의 공명효과로 현저한 차이를 나타내므로 전자 Swarm특성에 강한 영향을 받는다고 사료된다.
4. $E/N : 1\sim 300(Td)$ 영역에서는 전자Swarm 특성이 기체의 운동량 변환단면적이 Ramsauer minimum에서 큰 진동 여기충돌의 영향으로 나타나는 부구배(NDC)특성이 나타났으며 본 논문의 해석방법과 본 연구에 이용한 Y. Nakamura의 전자 충돌단면적의 타당성을 확인하였다.

6. 참고문헌

1. H. Itoh, M. Inomata, T. Matsumura, K. Satoh, Y. Suzuki, Y. Nakao, H. Tagashira "Electron Swarm Characteristics in Gas Mixtures Containing CF_4 ", T. IEE Japan, Vol. 116-A, No. 4, pp.328-333, 1996.
2. L. G. Christophorou, S. R. Hunter, J. G. Carter and R. A. Mathis, "Gases for possible use in diffuse-discharge switches", Appl. Phys. Lett. 4, pp.147-149, 1982.

3. 菅野卓雄 編著 “半導体プラズマプロセス技術” , 産業圖書, pp.38-50, 1993.
4. 山本, 生田, 電氣學會放電研究會資料, ED-92-101, pp.71-80, 1992.
5. “モンテカルロ法 と シミュレーション” , 培風館, 1989
6. 電氣學會技術報告, “氣體放電 シミュレーション技法” , 第140号, 1974.
7. J Lucas, H T Saelee , “A comparison of a Monte Carlo simulation and the Boltzmann solution for electron swarm motion in gases” , J. Phys. D:Appl. Phys., Vol. 8, pp.640-650, 1975.
8. 하성철, 전병훈, 백승권, “몬테 카로법을 이용한 Ar기체의 전자수송계수에 관한 연구” , 전기전자재료학회지, Vol. 8, No. 6, pp.685-692, 1995.
9. 中村, 富澤, 電氣學會放電研究會資料 ED-88-58, pp.29-37, 1988.
10. M Hayashi, “Swarm Studies and Inelastic Electron-Molecule Collisions” , L. C. Pitchford, Springer-Verlag, 1986.
11. M G Curtis, Isobel C Walker and K J Mathieson “Electron Swarm Characteristic Energies(D_r/μ) in Tetrafluoromethane(CF_4) at Low E/N” IOP Publishing Ltd, pp.1271-1274, 1988