

## 다항근사 볼츠만 방정식에 의한 CF<sub>4</sub>분자가스의 전자수송계수 해석

### The analysis of electron transport coefficients in CF<sub>4</sub> molecular gas by multi-term approximation of the Boltzmann equation

전병훈\*, 박재준\*, 하성철\*\*

(Byung-Hoon Jeon\*, Jae-June Park\* and Sung-Chul Ha\*\*)

#### Abstract

An accurate cross sections set are necessary for the quantitatively understanding and modeling of plasma phenomena. By using the electron swarm method, we determine an accurate electron cross sections set for objective atoms or molecule at low electron energy range.

In previous paper, we calculated the electron transport coefficients in pure CF<sub>4</sub> molecular gas by using two-term approximation of the Boltzmann equation. And by using this simulation method, we confirmed erroneous calculated results of transport coefficients for CF<sub>4</sub> molecule treated in this paper having 'C<sub>2v</sub> symmetry' as C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> and C<sub>3</sub>F<sub>8</sub> which have large vibrational excitation cross sections which may exceed elastic momentum transfer cross section.

Therefore, in this paper, we calculated the electron transport coefficients(W and ND<sub>L</sub>) in pure CF<sub>4</sub> gas by using multi-term approximation of the Boltzmann equation by Robson and Ness which was developed at James-Cook university, and discussed an application and/or validity of the calculation method by comparing the calculated results by two-term and multi-term approximation code.

**Key words** : electron collision cross sections set for CF<sub>4</sub> gas, two-term approximation of the Boltzmann equation, multi-term approximation of the Boltzmann equation, W, ND<sub>L</sub>

#### 1. 서론

일반적으로 전자군 방법에 이용되는 볼츠만 방정식 기법에는 2항근사와 다항근사 두 가지 기법이 있다. 우리는 이 두 가지 기법 중 가장 보편적이고 계산시간이 비교적 짧은 2항근사 기법을 이용하여 CF<sub>4</sub> 분자가스의 전자수송계수를 계산하였다.[1] 그러나 한 분자가스가 가지고 있는 단면적 특성 상 낮은 에너지 범위에서 탄성충돌단면적 보다 큰 비탄성충돌

단면적, 특히 진동여기 단면적을 가지고 있는 CF<sub>4</sub> 분자가스에서 2항근사 볼츠만 기법[2]의 이용은 정확한 전자수송계수의 해석과 단면적 결정에는 부적절함을 확인하였다. 따라서 본 논문에서는 다항근사 볼츠만 방정식을 이용하여 낮은 에너지 범위에서의 CF<sub>4</sub> 분자가스의 전자수송계수를 계산하고, 2항근사에 의한 계산값과 측정값과의 비교를 통해 전자수송계수의 해석과 정확한 단면적 측정을 위한 적절한 시뮬레이션방법의 적용에 대하여 논하고자 한다.

\* : 중부대학교 기술공학부  
(충남 금산군 추부면 마전리 산2-25,  
Fax : 041-750-6655  
E-mail : bhjeon@joongbu.ac.kr)  
\*\* : 동국대학교 전기공학과

#### 2. 볼츠만 방정식 해석

기체 중에서 하전입자군의 수송계수를 측정하는

방법에는 2항근사와 다항근사 볼츠만 방정식 해법, 몬테칼로 시뮬레이션 기법과 같이 3가지 방법이 있다. 여기서 TOF(time of flight) 샘플링 방법을 이용하여 가스들의 전자수송계수들을 산출하는데 이용한 2항근사와 다항근사 볼츠만 방정식은 열평형 상태에 서가 아닌 다입자계(多粒子系)운동의 기술에 이용해 이것을 전자군의 거동해석에 이용하고 있다. 볼츠만 방정식에서는 전자의 거동을 분포함수라는 거시적인 형태로 표시하고, 이 분포함수에서 전자수송계수를 산출한다. 특히 본 논문에서 이용한 다항근사 볼츠만 방정식은 James-Cook University의 Robson and Ness[3]에 의해 급진적으로 발전되어진 것이며, 이 해석법을 간략히 소개하면 다음과 같이 전개하고 있다.

전자에서 분자( $M$ )와 전자( $m$ )의 질량 비가 1보다 상당히 작기 때문에,  $m/M \ll 1$ , 단지 탄성충돌만이 일어나는 속도공간 내에서의 전자분포함수는 거의 등방성으로 작용하므로 2항근사는 구면조화(Spherical Harmonic)로 표현할 필요가 있다. 이에 Kumar *et al.*[4]은 구면조화에서의 분포함수의 표현을 다음과 같이 나타내고 있다.

$$f(v, r, t) = n(r, t) \sum_{l=0}^{l_{max}} \sum_{m=-l}^l f_m^{(l)}(v) Y_m^{(l)}(\theta, \phi) \quad (2-1)$$

여기서  $f_m^{(l)}(v)$ 는 텐서(tensor)계수,  $Y_m^{(l)}(\theta, \phi)$ 는 구면조화이며,  $l_{max}=1$ 일때 2항근사로 주어진다.

따라서  $l_{max} \gg 2$ 일때를 다항근사라 하며, 이 다항근사 기법은 Robson and Ness[4]에 의해 급진적으로 발전되어졌다. 그들은 전자속도분포함수를 Legendre와 Sonine 급수로 전개하였고, 전자수송계수들은 다양한 Legendre 다항식  $l$  과 Sonine다항식  $\nu$  에 의해 다음과 같은 수밀도에서의 연속 식으로부터 구하고 있다.

$$\partial_t n = -\alpha n - W \partial_z n + D_T (\partial_x^2 + \partial_y^2) n + D_L \partial_z^2 n \quad (2-2)$$

여기서  $\alpha$ 는 부착계수,  $W$ 는 전자기동속도,  $D_L$ ,  $D_T$ 는 종축확산, 횡축확산계수를 나타내고 있고, 각각의 전자수송계수는 다음과 같이 나타내고 있다.

<부착계수>

$$\alpha = 4\pi \int_0^\infty J_R^{(0)}[\mathcal{A}(00|00)] v^2 dv \quad (2-3)$$

<전자이동속도>

$$W = i \left[ \frac{4\pi}{3} \right]^{1/2} \int_0^\infty v^3 \mathcal{A}(10|00) dv - i\sqrt{4\pi} \int_0^\infty v^2 J_R^0[\mathcal{A}(00|11)] dv \quad (2-4)$$

<종축확산계수>

$$D_T = \left[ \frac{4\pi}{3} \right]^{1/2} \left[ \int_0^\infty v^3 \mathcal{A}(11|11) dv + \int_0^\infty J_R^0(\mathcal{A}(00|20)) + \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathcal{A}(00|20)) v^2 dv \right] \quad (2-5)$$

<횡축확산계수>

$$D_L = - \left[ \frac{4\pi}{3} \right]^{1/2} \left[ \int_0^\infty v^3 \mathcal{A}(10|11) dv + \int_0^\infty J_R^0(\mathcal{A}(00|20)) - \sqrt{2} (\mathcal{A}(00|22)) v^2 dv \right] \quad (2-6)$$

### 3. 전자충돌단면적

본 논문에서 이용된  $CF_4$ 분자가스의 전자충돌단면적을 그림 1에 나타내었다. 이 분자가스의 충돌단면적은 전자의 특성을 파악하는 기초자료로서 상당히 중요하며, 각각의 단면적(특히 낮은 에너지 범위에 있는 운동량변환단면적과 진동여기단면적)의 구조적 특성은 본 논문에서 논하고자하는 2항근사와 다항근사 볼츠만 방정식의 적용을 이해하는데 많은 도움이 되리라 보여진다.

$CF_4$ 분자가스는 Ar가스[5]의 운동량변환단면적  $Q_m$ 에서 보여주는 Ramsauer Townsend Minimum (RTM)과  $O_2$ 분자가스[6]에서 보여주는 여기단면적  $Q_v$ ,  $Q_{ex}$  등으로 구성되어있으며, RTM이 보여지는 0.18 eV 부근에서 커다란 진동여기충돌현상이 일어나는 특징을 가지고 있다.

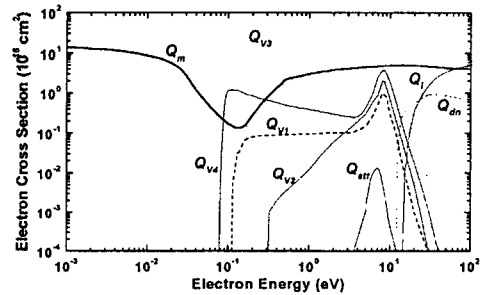


그림 1.  $CF_4$ 가스의 전자충돌단면적

Fig. 1. The set of electron collision cross sections set for  $CF_4$  molecular.

#### 4. 시뮬레이션 결과 및 고찰

그림 2와 3은 본 논문에서 이용된  $CF_4$ 가스의 2항 근사와 다항근사 볼츠만 방정식에 의해 계산된 전자 수송계수(W와  $ND_L$ )들이며, 각각 직선과 점선(+)으로 나타내고 있다. 그리고 이 값들은 Double Shutter Drift Tube[1]를 이용한 측정값들과 비교하였고, 그림에서 ■기호로 표시하고 있다.

그림 2와 3은 우리가 지금까지 이용하였던 Ar가스와  $O_2$ 가스에서 2항근사와 다항근사 기법을 이용한 전자수송계수의 비교 결과에서 두 기법을 이용한 계산결과와 오차가 거의 없는 것과는 다르게 두 시뮬레이션 방법에 따른 오차를 확실히 보여주고 있다.

또한 두 가스의 전자수송계수에서 Negative Differential Conductivity(NDC)현상[7]을 보다 확실히 보여주고 있으며, 이러한 현상이 보여짐은 앞의 설명과 그림 1의  $CF_4$ 분자가스의 전자충돌단면적 세트의 구성을 비교해보면 쉽게 이해가 되리라 보여진다. NDC현상이 보여지는 E/N범위(0.06~30 Td)에 대한 전자에너지 범위는 0.08 eV 이상이며, 시뮬레이션의 결과에서 보듯이  $C_3F_8$ ,  $C_3H_8$  분자가스와 같이 RTM의 운동량변환단면적과 커다란 비탄성충돌 단면적으로 구성되어 있으며, 전자의 속도분포함수에 비등방성이 강한 "CZv 대칭계"가스[8]들은 2항근사 볼츠만 방정식에 의해서는 정확한 전자수송계수를 산출할 수 없음을 단적으로 보여주고 있다.

그리고 이 그림들에서 보여지는바와 같이  $CF_4$ 분자가스를 이용하여 반도체 에칭 등의 플라즈마 현상을 정량적으로 이해하기 위해서는 다항근사법에 의한 정확한  $CF_4$ 분자가스의 전자충돌단면적 세트의 결정이 요구되어지고 있다.

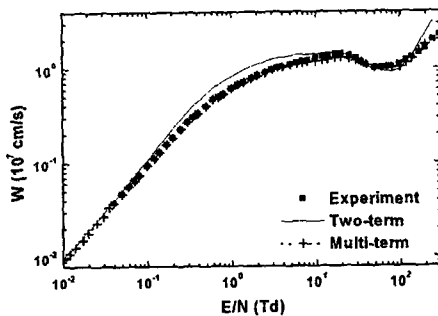


그림 2.  $CF_4$ 분자가스에서의 전자이동속도  
Fig. 2. The electron drift velocity in pure  $CF_4$

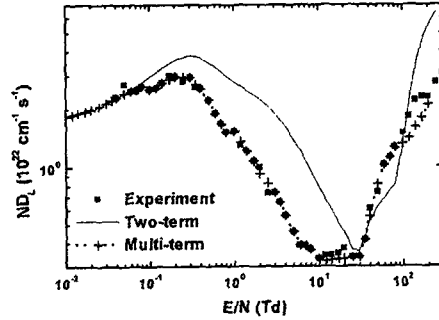


그림 3.  $CF_4$ 분자가스에서의 종방향확산계수( $D_L$ )와 기체분자수밀도(N)와의 곱  
Fig. 3.  $ND_L$  in pure  $CF_4$

#### 5. 결론

플라즈마 현상을 정량적으로 이해하려고 할 때, 또는 목적에 맞는 플라즈마를 만들기 위한 기체의 종류나 혼합비, 기체 압력 등의 평가를 하려고 할 때, 계산기에 의한 시뮬레이션은 유력한 수단이다.

이러한 시뮬레이션 기법 중 볼츠만 방정식 기법을 우리는 보편적으로 사용하고, 그 중에서 전자수송계수의 산출에 소요되는 시간이 비교적 짧은 2항근사 볼츠만 방정식을 가스의 구조적인 특성을 무시한 채 많이 사용하여 왔다. 여기에 본 논문에서는 2항근사와 다항근사 볼츠만 방정식의 두 시뮬레이션 기법을 이용한  $CF_4$ 분자가스의 전자수송계수(W와  $ND_L$ )의 계산결과와 오차를 통해 Ar가스와  $O_2$ 가스에서는 보여주지 않았던 두 시뮬레이션의 적절한 적용을 보여주었다. Ar가스와 같이 낮은 에너지 범위에 탄성충돌단면적이 RTM 특성의 유·무와는 상관없이 단독으로 존재할 때는 2항근사의 기법을 이용하여 전자수송계수의 산출 및 단면적 세트의 결정이 가능하며,  $O_2$ 분자가스와 같이 낮은 에너지 범위에 커다란 비탄성 충돌의 구조를 가진 단면적이 존재하더라도 그 단면적이 탄성충돌단면적보다 작은 값으로 존재할 때(비탄성충돌 < 탄성충돌) 2항근사 기법에 의한 전자수송계수는 거시적인 오차는 가지고 있으나 무시할 정도로 작아 수송계수의 특성 해석이나 단면적 세트의 결정이 가능하다. 또한 본 논문에서 이용된  $CF_4$ 분자가스와 같이 낮은 에너지 범위에서 탄성충돌에 비해 큰 비탄성 충돌 단면적의 구조(비탄성충돌

»탄성충돌)를 가진 " $C_{2v}$  대칭계"가스들은 전자의 속도분포함수에 비등방성이 강하기 때문에 정확한 수송계수의 산출과 그 분자가스가 가지고 있는 정확한 단면적 세트를 결정하기 위해서 다항근사 볼츠만 방정식 기법이 요구된다.

따라서 낮은 에너지 범위에서의 전자수송계수의 산출, 더 나아가 목적으로 하고 있는 가스의 전자충돌단면적 세트를 구성하기 위해서는 그 단면적이 가지고 있는 구조적인 특성을 우선 파악하고, 적절한 시뮬레이션 기법을 적용하여야만 한다.

#### 참고문헌

- [1] Jeon B H and Ha S C, *KIEEME Annual Spring Conference 2001*, 29-32, 2001
- [2] Tagashira H, Sakai Y and Sakamoto S, *J. Phys. D* **10**, 1051-1063, 1977
- [3] Robson R E and Ness K F, *Phys. Rev. A* **33**, 2068-2077, 1986
- [4] Kumar K, Skullerud H R and Robson R E, *Aust. J. Phys.* **33**, 343-448, 1980
- [5] Kurachi M and Nakamura Y, *J. Phys. D* **22**, 107-112, 1989
- [6] Jeon B H and Nakamura Y, *J. Phys. D* **31**, 2145-2150, 1998
- [7] Petrovic Z L, Crompton R W and Haddad G N, *Aust. J. Phys.* **37**, 23-34, 1984
- [8] Jeon B H, Ha S C and Yang J M, *J. of KIEEME*, **2**, 1, 7-11, 2001