

SiH<sub>4</sub> 가스의 에너지 분포함수 관한 연구

\*성낙진, 김상남  
인천전문대학

Analysis of Energy Distribution Function in SiH<sub>4</sub> Gas

\*Nak-Jin Seong, Sang-Nam Kim  
Incheon City College

**Abstract-** Energy distribution function in SiH<sub>4</sub> has been analysed over the E/N range 0.5~300Td and Pressure value 0.5, 1.0, 2.5 Torr by a two-term approximation Boltzmann equation method and by a Monte Carlo simulation. The motion has been calculated to give swarm parameters for the electron drift velocity, diffusion coefficient, electron ionization, mean energy and the electron energy distribution function. The electron energy distribution function has been analysed in SiH<sub>4</sub> at E/N=30, 50Td for a case of the equilibrium region in the mean electron energy and respective set of electron collision cross sections.

1. 序 論

기체에 전계를 인가하여 방전을 일으키면 기체분자의 일부는 이온화하여 큰 운동에너지를 갖는 자유전자가 발생한다. 이 자유전자는 주위에 기체분자와 탄성 및 비탄성 충돌을 반복하면서 운동에너지를 잃고, 이로 인하여 전자에너지 분포함수, 전하이동속도, 평균에너지, 및 종·횡확산계수 등(전자군parameter) 기체의 전자충돌단면적에 의하여 지배된다.

최근 SiH<sub>4</sub>(monosilane)가스는 반도체의 에칭공정 및 기능성 박막의 생성 등에 이용되는 기체 프라즈마로써 라디오파(Radio frequency) 및 마이크로파(Micro wave)로 여기시켜 수소화 비정질 실리콘 (a-SiH)를 제조할 때 원료가스로 이용된다[1]~[3]. 따라서 SiH<sub>4</sub>가스 프라즈마 중의 전자에너지분포함수와 수송특성을 명확히 규명하는 것은 매우 중요한 것이다.

한편 에너지 분포함수의 전자수 밀도에 의한 에너지 공간분포의 변화는 전리나 부착(전자수 비보존)으로 전하이동속도, 종·횡방향의 확산계수 등에 많은 영향이 미치는 것으로 보고되고 있다. 그리고 SiH<sub>4</sub>가스 프라즈마 내의 하전입자의 상호작용으로 활성화(radical)하여 생성과 소멸을 포함한 반응성 비평형 프라즈마 상태에서 MCS(Monte Carlo Simulation)기법[4],[5]과 BE(Boltzmann Equation)법[6]으로 전자에너지분포함수와 수송특성의 연구를 수행하였다. 이 연구를 수행하기 위하여 최근에 발표된 Haller[7], Tossell[8]등의 전자충돌단면적의 data를 이용하여 정량적으로 명확히 규명하고자 한다.

본 연구에서는 SiH<sub>4</sub>가스 프라즈마 중에서 MCS 및 BE법의 수치해석으로 전자에너지 분포함수 f(ε)를 구하고 그 에너지분포 함수로부터 전기전도특성을 나타내는 전하이동속도(W)와 전리계수(α/N), 종·횡축방향의 확산계수(ND<sub>L</sub>, ND<sub>T</sub>), 및 평균 에너지 및 특성에너지(DT/μ, DL/μ)등의 전자수송특성을 E/N : 0.5~300(Td) (E:전계, N:기체분자수 밀도, 1Td=1×10<sup>-17</sup>V·

cm<sup>2</sup>, N:3.5353×10<sup>16</sup>cm<sup>-3</sup> 0 °C 1 Torr에 해당)와 압력 P<sub>0</sub> : 1 (Torr) 범위에서 계산하고 그 결과를 Pollock[9][10], Ohmori[11]의 실험값과 비교하여 전자충돌단면적의 타당성에 대하여 검토한다. 그리고 평균에너지에 따른 전자에너지 분포함수를 BE법에 의한 PT, TOF, SST[5]의 전자Swarm법과 MCS법으로 계산한 수송특성을 해석하였다.

따라서 이들에 관한 연구는 고속컴퓨터의 성능향상과 수치적 해석방법의 정교함으로 인하여 혁신적으로 전자군파라미터 연구의 정확성과 신뢰성이 높은 영역까지 향상되고 있다. 본 연구에서는 전자의 비평형상태에서 SiH<sub>4</sub>가스의 충돌단면적(q<sub>m</sub>, q<sub>v</sub>, q<sub>a</sub>, q<sub>i</sub>, q<sub>α</sub> 등)을 Haller, Tossell 등이 결정한 값을 이용하여 E/N : 0.5~300[Td] [E:전계, N:기체분자수밀도, 1 Td= 1×10<sup>-17</sup> V·cm<sup>2</sup>, N : 3.5353×10<sup>16</sup>cm<sup>-3</sup> 0°C 1 Torr에 해당)와 압력 P<sub>0</sub> : 0.5, 1, 2.5[Torr] 범위에서 비등방성 산란을 고려하여 계산하고 그결과를 Pollock [5], Ohmori, Cottell and Walker [6]의 실험값과 비교하여 전자수송특성을 고찰하였다. 그리고 전자충돌단면적의 타당성에 대하여 검토하고 평균에너지에 따른 전자에너지분포함수를 볼츠만 방정식과 몬테칼로 시뮬레이션으로 계산한 전자수송특성을 해석하였다.

2. 解析 方法

본 해석에는 전자와 중성분자와의 상호작용으로 전리충돌에 의한 2차 전자발생, 비탄성충돌에 의한 전자에너지 손실을 고려하고 탄성 충돌에 의한 손실은 무시하였다. 전계중을 운동하는 전자의 궤도 계산은 R.W.L Thomas, T.Musha[12]의 방법을 이용하여 E/N : 0.5~300Td 범위에서 전체전자를 추적하여 비행시간법(Time of Flight method), 펄스 타운젠트법(Pulse Townsend method) 및 정상 타운젠트법(Steady state Townsend method) 등에 의하여 해석하였다[4][5].

펄스타운젠트법은 하전입자군의 성질을 구성입자의 위치에 관계없이 시간만의 함수로써 파악하는 것이며 정상타운젠트법은 평형평판간극의 외부에서 음극에 자외선 조사 등의 방법에 의하여 연속적으로 초기전자를 공급하여 간극내에서 정상입자류를 형성시킨후 간극 길이만의 함수로써 하전입자군의 수송계수를 관측하는 방법이다. 그리고 비행시간법은 하전입자군의 성장을 위치, 시간의 함수로써 파악하는 관측법으로 입자수 비보존의 경우에도 하전입자군의 성질을 정확하게 구할수

있는 장점을 가지고 있다.

본 연구에서는 전자군을 구성하는 전체의 전자를 해석하기 위해 전자를 수천회(5000회) 추적하는 것으로 설정하였다. 그리고 기체의 종류, 압력, 밀도, 각종 충돌단면적, 전계, 전자수로 기체분자와의 충돌을 반복하면서 전자사태를 형성하고 그 궤도가 양극에 도달한다. 한편 전리 및 부착작용에 의해서 생긴 전자는 그 시점에 대한 에너지, 위치, 및 속도 등의 값을 초기 전극간 분할수 (Sampling points : 20등분)와, 초기난수(Initial random number : 13)을 이용하여  $\Delta l = \lambda/10$  ( $\lambda$ :평균자유행정)[4],[5]법으로 전자군 parameter 를 MCS법으로 계산한다.

그리고 볼츠만법을 Philip . E . Luft Backward prolongation program[6]에 의해 전자에너지 분포함수는

$$\int_0^{\infty} \epsilon^{\frac{1}{2}} f(\epsilon) d\epsilon = 1 \dots\dots\dots(1)$$

에 의해 구한  $f(\epsilon)$ 값을 이용하여 각종 전자군 수송 특성을 Sparc Workstation SS-20 반복추적으로 계산한다.

그리고 MCS-BE법 시뮬레이션 data중 한 예를 다음과 같이 나타낸다.

### 3. 電子衝突 斷面積

본 연구에 이용한  $\text{SiH}_4$ 의 電子 충돌 단면적은 Haller [7], Tossell[8]의 값을 이용하여 계산하였고 그림3.1에 나타내었다

電子의 거시적 特性을 이해하는데 충돌단면적은 기초적 자료로서 이용된다. 또한 기체분자에 대한 電子의 충돌단면적은 電子의 에너지에 의해서 변화한다. 따라서 충돌입자간의 상호작용으로 기체분자의 여기, 해리, 이온화 등의 반응으로 여기단면적, 해리단면적, 이온화단면적 등으로 나타내며 전충돌단면적은 개개의 반응과정의 합으로 나타낸다.

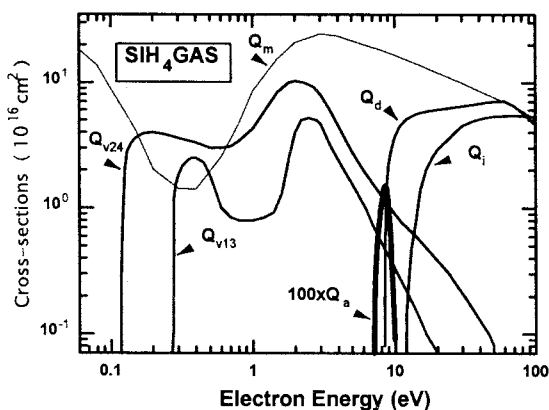


그림 3.1.  $\text{SiH}_4$ 가스의 전자충돌단면적  
Fig. 3.1. Collision cross section of electrons in  $\text{SiH}_4$  gas

## 4. 結果 및 考察

### 4.1 特性에너지

그림4.1에 나타난 종방향 특성에너지( $D_L/\mu$ )는  $E/N$  : 1.5~60[Td] 영역에서는 Pollock[13]과 Gar scadden et al[3]의 실험값과 거의 일치하였고  $E/N$  : 60~300[Td]에서는  $D_L/\mu$ [V]값이 증가하였다. 이것은 여기충돌에 의한 drift속도의 상승과 전리충돌에 의한 전자수 보존상태의 영향을 받는 것으로 생각된다.

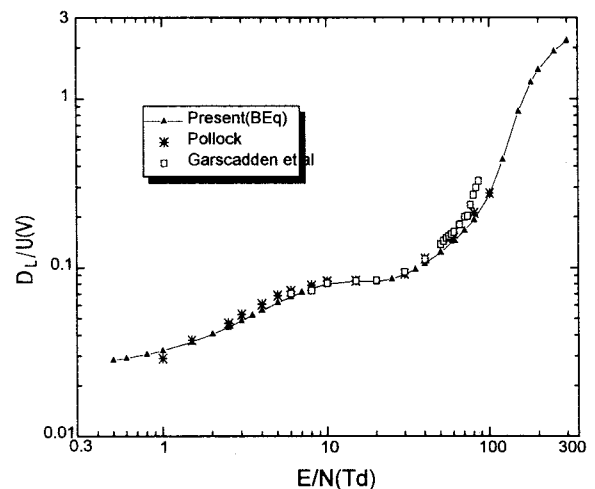


그림 4.1  $\text{SiH}_4$ 가스에서 종방향 특성에너지  
Fig. 4.1 Longitudinal characteristic energy in  $\text{SiH}_4$  gas

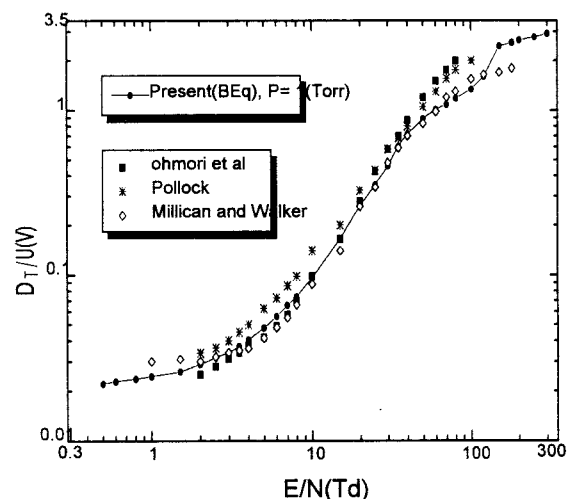


그림 4.2  $\text{SiH}_4$ 가스에서 횡방향 특성에너지  
Fig. 4.2 Transverse characteristic energy in  $\text{SiH}_4$  gas

횡방향 특성에너지( $D_T/\mu$ )는 그림4.2에서 전계에 수직 한 方向으로 확산하는 비율이  $E/N$  : 2~40[Td]범위에서는 Pollock과 Ohmori의 실험값과 거의 일치하나 그 외 영역에서는 Beq법에 의한 값은 다른 실험값과 다소 차

이를 나타낸 것은 이동도( $\mu=V_d/E$ )의 산출에 적용한 이동속도가 다르므로 E/N의 증가에 따라서 이동도는 감소하고 확산계수는 증가한 것으로 생각된다.

#### 4.2 平均에너지

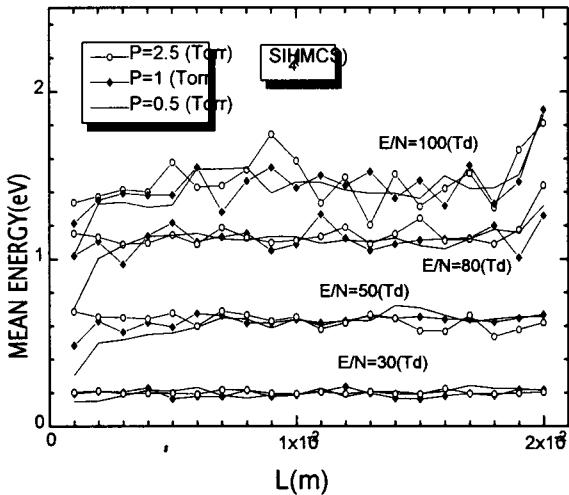


그림 4.3. SiH<sub>4</sub>가스에서 전자의 평균에너지  
Fig. 4.3 Mean energy of electron in SiH<sub>4</sub> gas

전자의 평균에너지( $\bar{\epsilon}$ )는 전극간거리 및 시간의 함수로써 계산되는 전자에너지분포, 전하이동속도 등에 관계되는 물리량이다. 전극면에서의 전자운동의 증가는 음극의 에너지가 양극으로 이동하고 양극에서는 반사나 음극으로 방출된 2차전자가 모두 흡수된다. 또한 전극간거리[cm]와 E/N : 30, 50, 80, 100[Td]의 변화에 따른 몬테칼로 시뮬레이션으로 압력 P : 0.5, 1, 2.5 [Torr]에 따라 추적한 값은 그림4.3에 나타냈으며 샘플링의 차에 의하여 음극과 양극 가까운 영역의 전자의 평균에너지는 영점으로부터 비탄성 충돌이 일어날 에너지까지는 직선적으로 상승하여 비평형의 상태로 나타나고 그 외 영역에서는 거의 평형상태의 에너지 값을 나타내었다.

#### 4.3 에너지 分布函数

전자에너지분포  $F(\epsilon)$ 는 그림4.4와 4.5에서 탄성 및 비탄성 충돌을 고려하여 E/N=30, 50[Td] 및 압력 P : 0.5, 1, 2.5[Torr]에 대하여 나타내었다. 그림에서

나타나듯이 MCS로 추적하여 나타난 전자에너지분포는 비평형상태로 이 때의 평균에너지 값이 각각  $\bar{\epsilon}$  : 0.21[eV],  $\bar{\epsilon}$  : 0.64[eV], Sample(2, 16), 거리(0.2, 1.6[cm])로 BEq법과 SST[5]법의 계산법과 전반적으로 차이를 나타내었다. 또한 여기로 인하여 전자의 에너지를 잃어버리는 것이 크면 비평형 영역도 크게 나타난 것으로 생각된다.

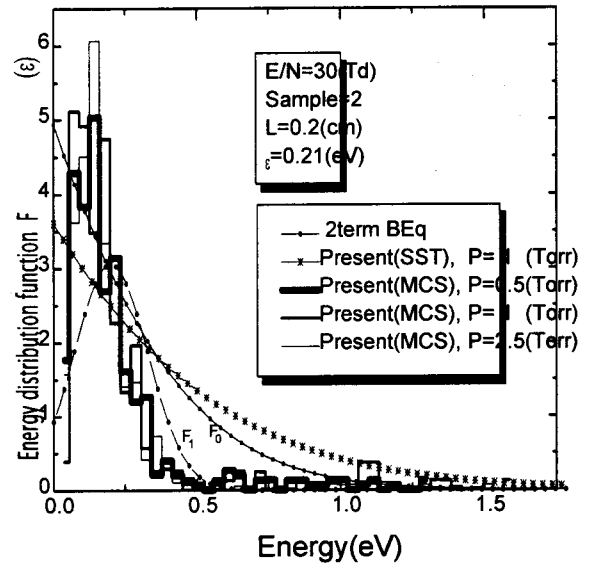


그림 4.4 SiH<sub>4</sub>가스에서 전자에너지 분포함수 I  
Fig. 4.4 Energy distribution function of electrons in SiH<sub>4</sub> gas I

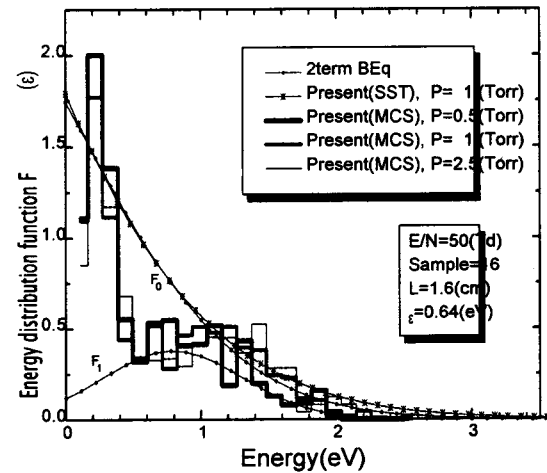


그림 4.5 SiH<sub>4</sub>가스에서 전자에너지 분포함수 II  
Fig. 4.5 Energy distribution function of electrons in SiH<sub>4</sub> gas II

### 5. 結 論

본 논문에서는 SiH<sub>4</sub> 가스의 전자충돌 단면적을 이용하여 E/N:0.5~300[Td], 압력P:0.5, 1, 2.5[Torr]범위에서 방전파라미터의 특성을 비평형 상태에서 몬테칼로 시뮬레이션과 볼츠만방정식으로 해석한 결과 종방향 확산계수( $ND_L$ )는  $Q_m$ 에 Ramsauer minimum을 가진 가스들의 독특한 특징을 나타내었으며 E/N[Td]의 증가에 따른 의존성이 크게 작용하고 있음을 예측할 수 있었고, 전자특성에너지( $D_L/\mu$ )는 E/N:1.5~60[Td]영역에서는 실측치와 거의 일치하였으나 E/N:60~300[Td]에서는 여기와

전리충돌의 반응으로 비탄성충돌 작용이 일어나고 있음을 예측할 수 있다. 그리고 특성에너지( $D_T/\mu$ )에서는 실험치와  $E/N:2\sim 40$ [Td]범위에서 일치하였으나 그 외 영역에서의 다소 차이를 보인 것은 이동도( $\mu=V_d/E$ )의 산출에 적용한 이동속도가 다르기 때문인 것으로 예측할 수 있었으며,  $E/N:30, 50$ [Td]에 대한 전자에너지 분포함수는 전충돌 단면적을 사용하여 계산하였고 그 값으로부터 전자군 파라미터를 계산하였다. 그리고 전자여기나 전리 등의 비탄성 충돌과 진동여기 단면적의 공명효과 때문에 방전파라미터의 특성에 큰 영향이 나타남을 알 수 있었고 압력변화에 따른 전자에너지 분포함수의 차이는  $E/N$ [Td]와 전자의 평균에너지의 값에 따라 큰 영향이 나타남을 확인하였다.

### [参 考 文 献]

- [1]菅野卓雄 “半導體 プラズマプロセス技術”, 産業圖書, pp.38-50, 1993.
- [2]小沼光晴著 “プラズマと成膜の基礎”, 日刊工業新聞社, pp.13-20, 1993.
- [3]大森義行, 下妻光夫, 田頭博昭, “SiH<sub>4</sub> 가스의 電子衝突斷面積 および 스웬트럼 파라미터” 電氣學會研究會資料, ED-86-114. HV- 86-34, 1988.
4. “몬테카를로法と 시뮬레이션”, 培風館, 1989.
- [5]電氣學會技術報告 “氣體放電시뮬레이션技法” 第140号, 1974.
- [6]Philip. E. Luft, “Description of a Backward prolongation program for computing transport coefficients”, JILA.information center report, No.19, 1975.
- [7]Haller I, “Importance of chain reactions in the plasma deposition of hydrogenated amorphous silicon” J. vac. Sci. Technol. A, 1, 1376 -82, 1983.
- [8]Tossell J. A, “MS-X $\alpha$  calculation of the elastic electron scattering cross sections and X-ray absorption spectra of CX<sub>4</sub> and SiX<sub>4</sub> (X=H, F, Cl)” J. chem. Phys., 80, 813-21, 1984.
- [9]Pollock WJ, “Momentum Transfer and Vibrational Cross-sections in Non-polar Gases” Trans. Faraday Soc., 64, 2919-26, 1968.
- [10]M Kurachi and Y Nakamura “Electron Collision cross sections for the monosilane molecule” J. Phys. D:Appl. Phys. 22, 107-112. 1989.
- [11]Ohmori Y, Kitamori K, Shimosuma M and Tagashira H, “Boltzmann equation analysis of electron swarm behaviour in methane” J. Phys. D, 19, 437 -55, 1986.
- [12]H. Itch and T.Musha “Monte Carlo Calculations of Motions in Helium” J. Phys. Soc.Japan, Vol.15, No.9, pp. 1675-1680, 1960.
- [13]Pollock WJ, “Momentum Transfer and Vibrational Cross-sectionsin Non-polar Gases” Trans. Faraday.Soc., 64, pp.2919-2926, 1988.