

2항근사 볼츠만 방정식을 이용한 CF₄분자가스의 전자수송계수의 해석

The study of electron transport coefficients in pure CF₄ by 2-term approximation of the Boltzmann equation

전 병훈, 하 성철*

(Byung-Hoon Jeon and Sung-Chul Ha*)

Abstract

We measured the electron transport coefficients(the electron drift velocity, W , and the longitudinal diffusion coefficient, D_L) in pure CF₄ over the E/N range from 0.04 Td to 250 Td by the double shutter drift tube. And these electron transport coefficients in pure CF₄ were calculated over the E/N range from 0.01 to 250 Td at 1 Torr by using the two-term approximation of the Boltzmann equation.

Key Words : Electron drift velocity, Longitudinal diffusion coefficient, Electron transport coefficient, CF₄ molecular gas, Two-term approximation of the Boltzmann equation

1. 서론

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. 그리고 시뮬레이션이 정량적으로 있기 위해서는 플라즈마를 구성하는 기체와 전자와의 상호작용에 관한 지식, 특히 전자충돌단면적의 정확한 데이터와 개개의 기체분자가 가지고 있는 전자수송계수의 해석은 필수 불가결한 상태이다.

전계중에 존재하는 기체는 방전플라즈마 현상으로 전자군의 성질이 변화하게 되므로 이것을 해석하기 위해서는 전자기동속도, 전리계수, 부착계수, 실효전리계수, 종축확산계수, 횡축확산계수, 평균에너지 및 전자에너지 분포함수를 파악하는 것이 상당히 중요하다. 이러한 연구는 초기에 H.Itoh[1], T.Musha[2], Thomas[3]에 의해 연구되었는데 이것은 방전 공간 내에서 나타나는 전체의 전자를 추적하여 전자기동속도 등 전자수송계수의 동향을 조사하여 이들 전자의 물리량을 가상적으로 샘플링(Sampling)하고 그들 하전입자의 운동을 전자계산기로 계산하여 전자수송계수의 특성을 확률적으로 결정하는 것이다.

본 연구에 이용되고 있는 CF₄가스는 반도체 디바이스 제조 공정의 플라즈마 에칭에 많이 이용이 되고 있는데 이 기체는 전극 등이 고체 표면에 흡착하기 쉬운 성질과 전자 부착성 때문에 높은 절연 내력을 가지고 있고 최근에는 약전리 기체 플라즈마 프

중부대학교 컴퓨터응용설계학과
(충남 금산군 추부면 마전리 산2-25)

Fax : 041-750-6655

E-mail : bhjeon@joongbu.ac.kr

* 동국대학교 전기공학과

(서울시 중구 필동 3가)

로세스의 에칭(etching)가스로서 또는 반도체 미세 가공 분야 등에도 이용이 기대되고 있다.[4]

본 논문에서는 전자군(Electron Swarm) 방법을 이용하여 CF₄ 분자가스의 정확한 전자충돌단면적의 결정과 순수CF₄ 분자가스에서의 전자수송계수의 정확한 물성적 해석을 위하여, 0.02~300 Td에 이르는 광범위한 E/N 범위에서 전자기동속도와 종축확산계수를 Double Shutter Drift Tube[5]라는 실험장치를 이용하여 측정하고 이들 값들을 2항근사 볼츠만 방정식을 이용하여 계산하여 해석하고 있다.

2. 2항근사 볼츠만방정식 해석

기체 중에서 하전입자군의 수송계수를 측정하는 방법에는 2항근사와 다항근사 볼츠만 방정식 해법과 몬테칼로 시뮬레이션 기법과 같이 3가지 방법이 있다.

그 중에서도 볼츠만 방정식은 열평형 상태에서가 아닌 다입자계(多粒子系) 운동의 기술에 이용해 이것을 전자군의 거동 해석에 이용하고 있다. 볼츠만 방정식 해석에서는 전자의 거동을 분포함수라고 하는 거시적인 형태로 표시하고, 이 분포함수에서 전자수송계수를 산출한다. 이 방법에서는 충돌의 확률적인 성질을 기초로 하여 전자군 발달(發達)의 통계적 변동은 나타나지 않으며, 통계시간은 비교적 짧다. 그러나, 미적분방정식으로 된 볼츠만 방정식은 일반적으로 그 해를 구하는 것이 어렵고, 종래 많이 사용되어왔다. 전자의 속도분포함수를 Legendre 급수로 전개하고, 그 최초의 2항에 근사하는 2항근사는 전자의 속도분포함수에 비등방성이 강한 경우에는 정확한 전자수송계수를 산출할 수 없는 단점을 가지고 있다.

다음은 본 연구에서 이용된 2항근사 볼츠만 방정식에서 TOF(Time of flight)방법을 이용한 전자수송계수 산출을 보여주고 있다.

TOF에서는 위치와 시간을 함께 지정하기 때문에 샘플 수는 적고 한편으로 에너지분포를 구할 때 샘플 수는 차츰 적어져 통계적 변동을 다수 포함한 결과로 되기 쉽다. 전자 수를 많이 택하면 전자계산기의 계산시간도 그에 비례하여 증가하므로 이것을 보완하기 위하여 순수한 관측 법에서의 차이를 지정하는 영역에서 어느 정도의 폭을 갖게 한다. TOF 샘플링법으로 방전공간의 전자기동속도, 확산계수, 평균에너지를 구하기 위해서는 시간 t_k , t_{k+1} 에서 전자의 샘플 수를 M_k , M_{k+1} 로 하고 위치영역을 $Z(t_k)$ 로 할 때 시간 t_k 에서의 전자군 중심의 평균위치

$\langle Z(t_k) \rangle$ 는 다음과 같이 식 2.1로 나타낸다.

$$\langle Z(t_k) \rangle = \frac{1}{M_k} \sum_{j=1}^{M_k} Z_j(t_k) \quad 2.1$$

전자군의 중심이동속도 W 는 다음과 같다.

$$W = \frac{\langle Z(t_{k+1}) \rangle - \langle Z(t_k) \rangle}{(t_{k+1} - t_k)} \quad 2.2$$

한편 전자의 확산계수는 시간 t_k 일 때 전자의 전계 방향의 중심위치를 $Z_m(t_k)$ 라하면, 종방향확산계수 D_L 은 전자의 전계 방향의 위치분산으로 표현하여 아래의 식과 같이 표현하고, 시간에 대한 기울기로 그 값을 구할 수 있다.

$$\frac{1}{2!M_k} \sum_{j=1}^{M_k} (Z_j - Z_m(t_k))^2 \quad 2.3$$

한편, 횡방향확산계수 D_T 는 전계와 직각방향의 위치분산으로 다음과 같이 표현하고, 시간에 대한 기울기로 구한다.

$$\frac{1}{2} \frac{1}{2!M_k} \sum_{j=1}^{M_k} (r_j^2) \quad 2.4$$

여기서 r_j 는 Z_j 의 직각방향 성분이다. 평균에너지($\bar{\epsilon}$)는 i 번째의 에너지를 ϵ_i 라고 하면

$$\langle \bar{\epsilon} \rangle = \frac{1}{M_k} \sum_{j=1}^{M_k} \epsilon_j \quad 2.5$$

으로 나타낸다.

전자수가 보존되지 않는 경우 즉 전리, 부착이 일어나는 경우에 대해서도 샘플 수 M_k , M_{k+1} 등이 변화하는 상태이므로 동일한 방법으로 구할 수 있다.

3. 전자 충돌 단면적

본 논문에서 사용한 CF₄ 분자가스의 전자충돌단면적을 그림 1에 나타내었는데 이들 충돌단면적은 전자의 특성을 파악하는 기초 자료로써 상당히 중요하다. 특히 여러 단면적 중에서 절연가스에 관련된 전리와 부착단면적, 에칭에 관련된 여기, 해리 단면적은 충돌단면적에서도 상당히 중요하다.

그림 1의 CF₄의 전자충돌단면적은 운동량 변환단면적(Q_m)의 0.1~0.8 eV범위에서 Ramsauer Townsend Minimum(RTM)을 가지며 이 지점에 큰 진동여기단면적(Q_{v3}, Q_{v4})이 존재하기 때문에 단면적 결정에 어려움이 있다. 또한 진동여기단면적의 두 번째 피크를 형성하고 있는 4-10 eV 범위에 비교적 큰 부착 단면적을 가지고 있어, 이것이 전자부성특성을 나타

내는 원인이 되고 있다.

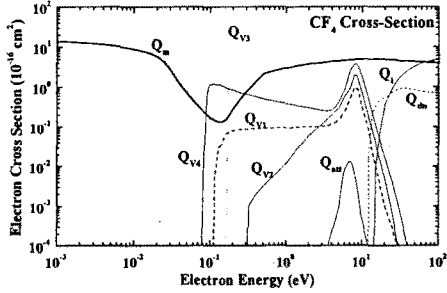


그림 1. CF₄가스의 전자충돌단면적
Fig. 1. The set of electron collision cross sections for CF₄ molecular

4. 시뮬레이션 결과 및 고찰

4.1 전자기동속도

그림 2의 전자기동속도는 0.01~300 Td에 이르는 광범위한 E/N범위에서 순수 CF₄분자가스의 실험결과와 계산결과를 비교하고 있다. 실험결과는 기호(■)로 표시하고 있으며, 계산결과는 직선으로 나타내고 있다.

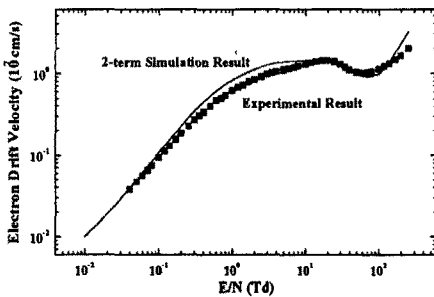


그림 2. 순수 CF₄분자가스의 전자기동속도
Fig. 2. The electron drift velocity in pure CF₄ gas

이 그림에서 Double Shutter Drift Tube를 이용한 측정결과는 CF₄분자가스가 가지고 있는 0.1~0.8 eV 부근에서의 운동량변환단면적의 RTM과 큰 진동여기단면적의 충돌에 의해서 낮은 에너지대의 전자가

많기 때문에 전자에너지의 커다란 순환이 발생하고 완화시간의 감소로 E/N=30~100 Td에서 E/N증가에 따라 전자기동속도가 감소하였다가 증가하는 부구배 특성(Negative Differential Conductivity, NDC)[6]이 나타난다.

E/N이 0.1~10 Td에 이르는 범위와 100 Td 이상의 높은 E/N범위에서 실험결과와 계산결과가 10% 이상의 오차를 보여주고 있다.

4.2 종축확산계수

그림 3은 종방향확산계수 D_L 과 기체분자수밀도 N 과의 곱인 ND_L 을 E/N의 함수로 나타내었다.

순수 CF₄분자가스에서는 E/N=0.3 Td에서 서서히 감소하다 약 30 Td부근에서 E/N의 증가와 함께 서서히 증가하며, 전자기동속도의 결과에서 보여지는 것과 마찬가지로 모두 부구배의 특성이 나타나고 있다.

본 그림에서는 나타내고 있지 않지만, 압력변화에 따른 ND_L 의 결과는, 압력이 클수록 낮은 E/N에서 존재하며, 압력이 낮아질수록 보다 높은 E/N에서 나타나게 된다. 즉, E/N이 커짐에 따라 전자는 큰 평균운동에너지를 가지게 되어 전자의 무질서한 운동이 강하게 되고, 기체원자·분자와의 충돌빈도가 높게 되기 때문에, 전자군이 확산하는 것이 작게 된다. 따라서 이 영역에서 ND_L 의 감소, 즉 확산계수의 감소가 일어나게 된다고 할 수 있다.

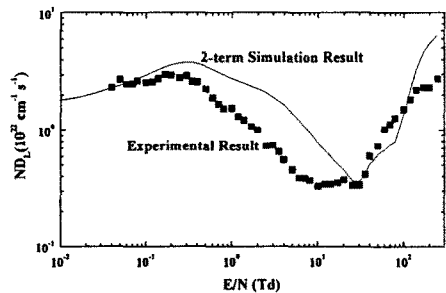


그림 3. 순수 CF₄분자가스에서의 종방향확산계수 (D_L)와 기체분자수밀도(N)와의 곱
Fig. 3. ND_L in pure CF₄

그림 4는 종방향 확산계수와 이동도의 비인 종방향특성에너지 D_L/μ 를 E/N=0.01~300 Td의 변화에 따라 나타낸 것이다. 여기서 μ 는 ω/E 로서, 이동도를 나타낸다. 본 그림에서는 나타내고 있지 않지만,

다른 희가스와의 혼합가스인 경우, CF_4 분자가스의 혼합비가 높을수록 작은 값을 가지고, E/N 이 높을수록 기울기가 급격해지고 있다. 따라서 E/N 증가에 따른 종방향특성에너지의 증가는 여기충돌에 의한 이동속도의 상승과 전리충돌에 의한 혼합비의 전자 수 보존상태의 영향을 받는 것으로 생각되어진다.

그림 3과 4에서도 전자기동속도에서의 결과와 마찬가지로 E/N 이 0.1~30 Td에 이르는 광범위한 범위에서 실험결과와 계산결과 사이에 커다란 오차를 보여주고 있다.

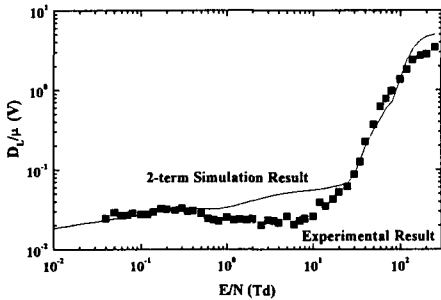


그림 4. 순수 CF_4 분자가스에서의 종방향특성에너지
Fig. 4. D_L/μ in pure CF_4

5. 결론

순수 CF_4 분자가스의 전자수송계수를 Double Shutter Drift Tube를 이용하여 측정하였고, 전자충돌단면적을 이용하여 0.01 Td ≤ E/N ≤ 300 Td 범위에서 이 값들을 2항근사 볼츠만 방정식의 TOF 샘플링으로 계산하여 비교하였다. 그 결과 측정된 전자기동속도와 종축확산계수에서 CF_4 분자가스가 가지고 있는 운동량변환단면적의 RTM과 큰 진동여기 단면적의 충돌에 의해 NDC 현상을 보여주고 있다. 한편 계산결과에서도 이와 같은 현상을 보여주고 있으나, 측정결과와의 커다란 오차, 특히 종축확산계수에서 보여주고 있어 정확한 해석은 곤란한 실정이다.

계산결과에서 이와 같은 오차를 보여주는 원인은 앞에서 설명한바와 같이 2항근사 볼츠만 방정식이 전자의 속도분포함수에 비등방성이 강한 경우, 다시 말해 시뮬레이션에 이용되는 초기 단면적의 구성에서 운동량변환단면적보다 큰 여기단면적이 존재하면 정확한 전자수송계수를 산출할 수 없다는 예를 단적으로 보여주고 있는 것으로 풀이된다.

따라서 CF_4 분자가스의 정확한 정량적 해석을 위

해서는 다항근사 볼츠만 방정식이나 몬테칼로법에 의한 계산 방법이 요구되어 진다.

참고문헌

- [1] H. Itoh, Y. Miura, N. Ikuta, Y. Nakao and H. Tagashira, "Electron swarm development in SF_6 : I. Boltzmann equation analysis", J. Phys. D: Appl. Phys. 21, pp. 922-930, 1988.
- [2] H. Itoh and T. Musha, "Monte Carlo Calculations of Motions in Helium", J. Phys. Soc. Japan, Vol.15, No.9, pp. 1675-1680, 1960.
- [3] R. W. L. Thomas, and W. R. L. Thomas, "Monte Carlo Simulation of electrical discharge in gases", J. Phys. B. Vol. 2, pp. 562-570, 1969.
- [4] M. Hayashi, and S. Hara, "Joint Symposium on Electron and Ion Swarm and Low Energy Electron Scattering", A Satellite of ICPEAC XVII, Proc., pp. 109-111, 1991.
- [5] Y. Nakamura and M. Kurachi, "Electron Transport Parameters in Argon and its momentum transfer cross section" J. Phys. D21, pp. 718-723, 1988.
- [6] 하 성철, 전 병훈, "볼츠만 방정식과 몬테칼로법에 의한 SiH_4 -Ar 혼합가스의 전자수송계수에 관한 연구", 한국전지전자재료학회지 14권, 2호 pp. 169-174, 2001