

시물레이션을 이용한 混合氣體에서 電子에너지분포함수

A Simulation of the Energy Distribution Function for Electron in Gas Mixtures

김상남* 유희영** 하성철***

(Sang-Nam Kim* Heoi-Young Yu** Sung-Chul Ha***)

Abstract

Energy Distribution Function in pure CH₄, CF₄ and mixtures of CF₄ and Ar, have been analyzed over a range of the reduced electric field strength between 0.1 and 350[Td] by the two-term approximation of the Boltzmann equation (BEq.) method and the Monte Carlo simulation (MCS). The results of the Boltzmann equation and the Monte Carlo simulation have been compared with the data presented by several workers. The deduced transport coefficients for electrons agree reasonably well with the experimental and simulation data obtained by Nakamura and Hayashi. The energy distribution function of electrons in CF₄-Ar mixtures shows the Maxwellian distribution for energy. That is, $f(\epsilon)$ has the symmetrical shape whose axis of symmetry is a most probably energy

1. 서 론

최근 새로운 산업 응용분야에서 방전 플라즈마 응용기술이 폭넓게 이용되고 있다. 특히 약 전리기체 방전 플라즈마 현상은 높은 에너지 밀도의 발생이 가능하게 하였으며, 제어핵융합으로 미래의 에너지 자원 개발, 반도체 박막공정, 예칭, plasma display, 기체 플라즈마 CVD (Chemical Vapor Deposition), 기체 Laser 등의 새로운 가공법에 대한 연구가 활발히 진행되고 있다. 약전리 기체 방전 플라즈마 현상을 지배하는 전자 수송계수 특성에 대해 난수기술에 대한 다변수 문제의 정량적 수치해석과 확률적 요소를 포함한 컴퓨터 시물레이션 및 실험적 방법으로 많은 연구가 이루어지고 있다.

2. 해석 방법

몬테칼로법은 2차대전기간 동안에 원자탄 개발을 위한 중성자 수송에 관련된 문제를 해결하기 위한 목적으로 많은 과학자들에 의해 연구, 발전되어왔다. 다양한 응용분야에서의 몬테칼로법 중에서 기체중의 전자의 거동에 관한 몬테칼로 시물레이션(MCS)으로는 H. Itoh, M. Musha 및 R. W. L. Thomas, W. R. L. Thomas 에 의해서 최초의 연구가 시작되었다.

전계가 존재하는 공간의 방전 메카니즘에 있어서 전자는 전계에 의해서 높은 에너지를 갖게 되지만 전자에너지가 평형상태에 있지 않으므로 전자에너지 분포를 추정하기는 매우 어렵다. 몬테칼로 시물레이션은 매우 유용하다. 전자군 시물레이션 결과는 FORTRAN77을 SPARC WORKSTATION을 이용하여 계산하였다.

3. 전자충돌 단면적

3.1 CF₄ 기체에서 전자의 충돌단면적

본 연구에 이용한 CF₄의 전자충돌단면적은 운동량 변환단면적(Q_m), 진동여기단면적(Q_{v1}, Q_{v2}), 부착 단

* 인천전문대학 전기공학과
(인천광역시 남구 도화동 인천전문대학,
Fax: 032-760-8895
E-mail : sn7332@hanmail.net)
** 대림대학 전자과
*** 동국대학교 전기공학과

면적(Q_d), 여기 단면적(Q_{ex}), 해리단면적(Q_d) 및 전리 단면적(Q_i)으로 구성되어 있다.

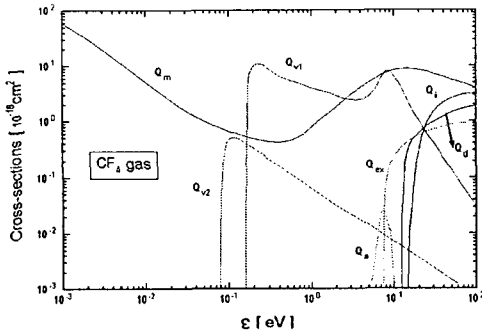


그림 3.1 CF₄ 기체에서 전자의 충돌단면적
Fig. 3.1 Collision cross sections for electrons in CF₄

3.2 CH₄ 기체에서 전자의 충돌단면적

그림 3.2는 CH₄ 기체의 충돌단면적을 나타낸다. 입자간의 상호충돌작용으로 나타난 기체분자의 운동량변환단면적 (Q_m), 진동여기단면적(Q_{v13} , Q_{v24}), 전리 단면적(Q_i), 전자부착단면적(Q_a), 해리단면적(Q_d) 및 여기단면적(Q_{ex})이 Crompton, Kitamori, Kline등에 의한 전자 Beam 실험값으로 구성되었다.

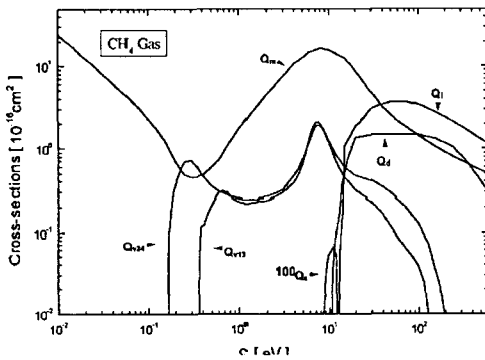


그림 3.2 CH₄ 기체에서 전자의 충돌단면적
Fig. 3.2 Collision cross sections for electrons in CH₄

3.3 Ar 기체에서 전자의 충돌단면적

시뮬레이션에서 그림 3.3의 전자충돌 단면적을 운동량 변환 단면적(Q_m), 여기 단면적(Q_{ex}), 전리 단면적(Q_i)으로 나타내었다.

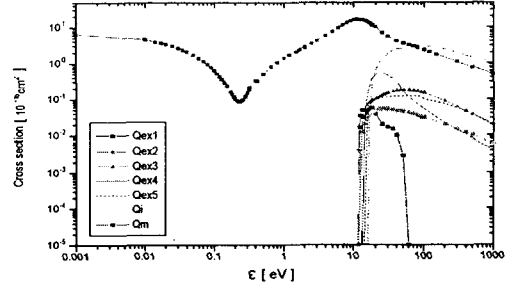


그림 3.3 Ar 기체에서 전자의 충돌단면적
Fig. 3.3 Collision cross sections for electrons in Ar

4. 결과 및 고찰

4.1 CF₄, CH₄, Ar 의 에너지 분포함수

그림 4.1, 4.2, 4.3은 전자수송계수에 직접 관련되는 물리량인 전자에너지분포 $f(\epsilon)$ 를 $E/N=100, 200, 300$ Td에 대하여 나타낸 것이다. 전자에너지분포는 전자가 전계로부터 에너지를 받고 원자 또는 분자와의 충돌에 의하여 에너지를 잃는 균형관계에서 결정되는 중요한 물리량으로 플라즈마 프로세싱에 유용하게 이용되고 있다

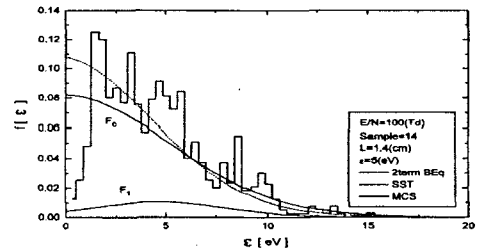


그림 4.1 E/N=100 CF₄ 기체에서 에너지 분포함수
Fig. 4.1 Energy distribution function in CF₄ at E/N=100

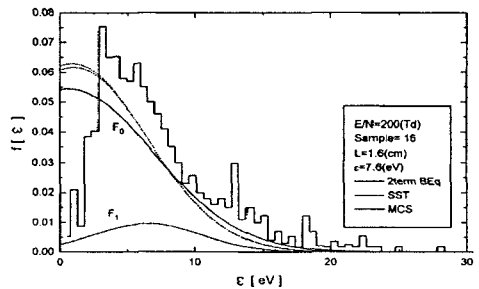


그림 4.2 E/N=200 인 CF₄ 기체에서 전자의 에너지 분포함수
Fig. 4.2 Energy distribution function in CF₄ at E/N=200 Td

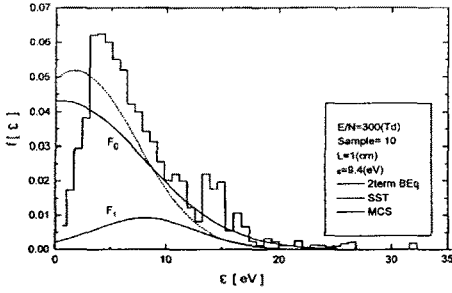


그림 4.3 E/N=300 Td 상태인 CF₄ 기체에서 에너지 분포함수
Fig. 4.3 Energy distribution function for electrons in CF₄

전자가 전계에 의하여 운동할 때 각 E/N에 대한 Sample(14, 16, 10), 거리(1.4, 1.6, 1 cm), 평균에너지 (5, 7.6, 9.4 eV)범위에서 MCS법으로 전자를 추적하여 나타난 전자에너지분포 $f(\epsilon)$ 는 볼츠만 2항 근사식에 의한 BEq의 SST의 계산값과 전반적으로 큰 차이를 나타내었다]

MCS법에 의하여 계산한 에너지분포함수와 볼츠만 방정식의 수치해석에 의한 결과는 E/N=100, 200, 300 Td에서 큰 차이가 나타났다. E/N이 증가할수록 고에너지 전자가 증가함을 알 수 있고 평균에너지 값도 상승한다. 그러나 전자밀도 (전자에너지 분포함수 곡선과 X축과 이루는 면적)는 E/N이 증가할수록 감소한다.

그림 4.4, 4.5는 각각 E/N=10 Td와 100 Td 일 때 순수 CH₄ 기체에서의 전자에너지 분포함수를 나타낸다.

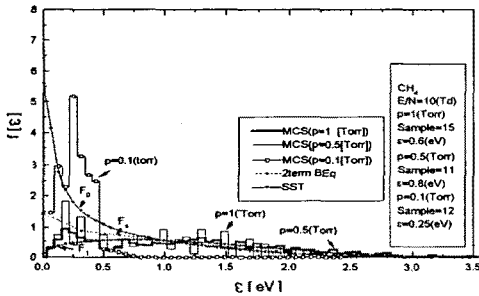


그림 4.4 E/N=10 Td 상태인 CH₄ 기체에서 전자의 에너지 분포함수
Fig. 4.4 Energy distribution function for electrons in CH₄ at E/N=10 Td

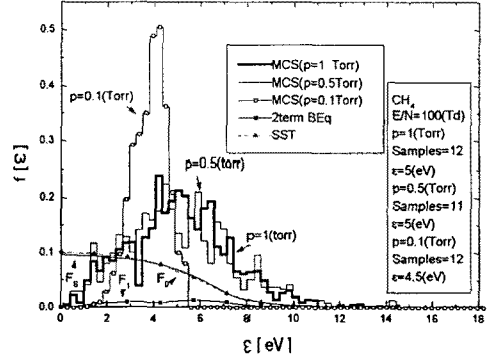


그림 4.5 E/N=100 Td 상태인 CH₄ 기체에서 전자의 에너지 분포함수
Fig. 4.5 Energy distribution function for electrons in CH₄ at E/N=100

$f(\epsilon)$ 의 초기값에서는 전자에너지가 증가하고 높은 에너지측에서는 감소하는 경향이 나타난다. 이러한 현상은 진동여기충돌과 진동여기단면적의 공명효과 때문에 나타나는 것으로 생각된다.

그림 4.6, 4.7은 Ar기체에서 탄성 및 비탄성산란을 고려하여 압력 P=0.1 Torr에서 E/N을 가변하여 전자에너지분포 $f(\epsilon)$ 를 MCS법과 BEq의 볼츠만 2항 근사해석으로 나타낸 것이다.

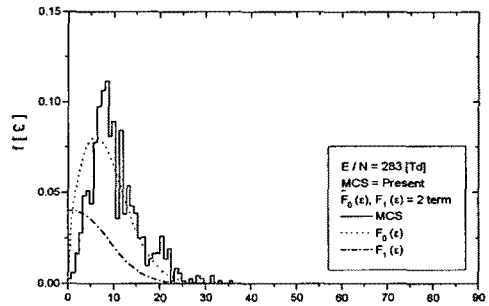


그림 4.6 E/N=283 Td 상태인 Ar 기체에서 전자의 에너지 분포함수
Fig. 4.6 The energy distribution function for electrons in Ar at E/N=283

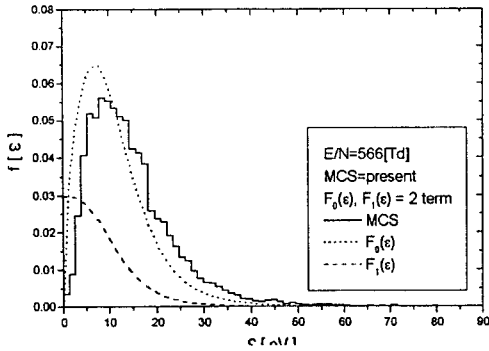


그림 4.7 E/N=566 Td 상태인 Ar 기체의 전자의 에너지 분포함수
Fig. 4.7 Energy distribution function of electron in Ar at E/N=566

4.2 CF₄-Ar 의 에너지 분포함수

그림 4.8과 4.9는 E/N=50 Td에서 CF₄기체가 0.1%와 5%가 함유된 혼합기체에서 전자의 에너지 분포함수를 나타낸 것으로 그림 4.8에서 F(ε)의 초기값에서는 전자에너지가 증가하고 높은 전자에너지 측에서는 감소하는 경향이 나타났다. 이와 같은 현상은 CF₄ 기체의 진동 여기충돌과 진동 여기단면적의 공명효과 때문에 나타나는 것으로 생각된다.

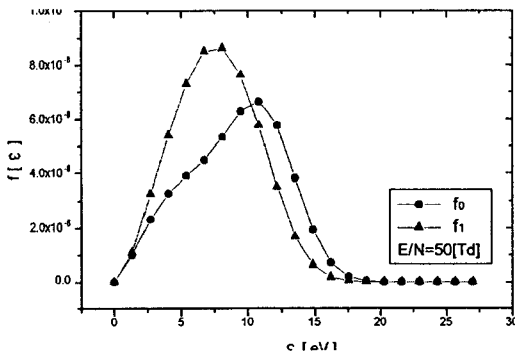


그림 4.8 CF₄(0.1%)-Ar(99.9%) 혼합기체에서 에너지 분포함수
Fig. 4.8 Energy distribution function for electrons in mixtures

그림 4.9에서도 전자에너지 분포는 전계 효과에 의하여 Maxwell-Boltzmann 분포가 높은 에너지 영역으로 이동하고 기체입자와의 비탄성충돌 Threshold 전압이상에서는 에너지분포가 감소하는 것으로 나타났고 일반적으로 박막작성(薄膜作成)에 사용되는 저온플라즈마중의 전자의 에너지분포함수는 Maxwell-Boltzmann 분포로 가정한다. 이것은 E/N=50 Td 영역에서는 전자여기나 전리 등의 비탄성충돌로 급격

히 감소되어 나타나는 현상으로서 민감한 반응으로 여겨진다.

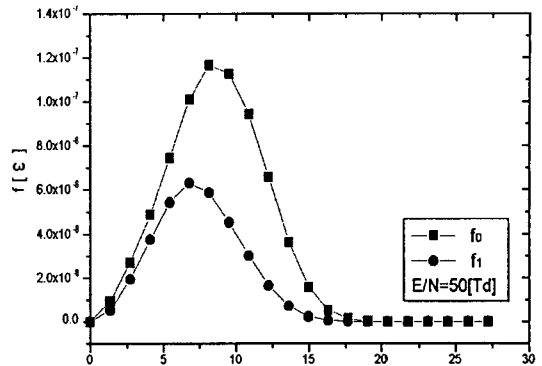


그림 4.9 CF₄(5%)-Ar(95%) 혼합기체에서 에너지 분포함수
Fig. 4.9 Energy distribution function for electrons in mixtures

5. 결론

본 논문에서는 2항 근사의 볼츠만 방정식과 몬테칼로법에 의하여 순수 CH₄ 및 Ar에 미량의 CF₄를 혼합한 기체 중에서 전자군 수송계수와 전자에너지 분포함수를 시뮬레이션에 의해 정량적으로 계산하였으며, 그 결과 다음과 같은 결론을 얻었다.

CF₄-Ar 혼합기체의 에너지 분포함수는 초기 에너지에서는 증가하고 그 이상의 전자에너지에서 감소하는 경향이 나타났다. 따라서, 본 연구에 이용한 운동량변환 단면적, 여기 단면적, 진동여기 단면적 및 전리·부착 단면적 등의 타당성이 밝혀졌다.

이처럼 컴퓨터를 이용한 시뮬레이션으로 MCS법과 볼츠만법에 의한 결과값은 실험값과 거의 일치하는 것으로 최근에 공학적으로 유효한 수단이 되고 있으며 우수한 프로그램이라는 것이 입증됨으로써 실험에 드는 비용 및 시간을 크게 절약할 수 있고 CF₄ 플라즈마를 이용한 기판가공 기술, 반도체의 박막 공정, 플라즈마 에칭기술, Plasma CVD의 활용 및 기초적인 물성data를 얻는데 크게 기여할 것으로 판단되어진다.

[참고문헌]

- [1] Flamm D. L., "Plasma Processing of Semiconductors" Williams P F, NATO ASI series, pp.1~22. 1997.
- [2] H. Itoh, T. Matsumura, K. Satoh, Y. Nakao

- and H. Tagashira, "Development of electrons swarms in CF₄", Proc. 21st int. Conf. on Phenomena in Ionized Gases, (ICPIG) (Bochum : Germany) 1, pp. 245-6, 1993.
- [3] E. W. Mc Daniel and E. A. Mason "The Mobility and Diffusion of Ions in Gases" John Wiley and Sons. Inc. pp. 3~82, 1973
- [4] S. A. J. Al-Amin and J. Lucas, "Electron swarm parameters in oxygen and methane", J. Phys. D:Appl. 18. pp. 1781-1794, 1985.
- [5] 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.
- [6] 武田進, "氣體放電の基礎", 東明社, pp. 24-25, 1974.
- [7] 奥田孝美, "氣體プラズマ現象", コロナ社, pp. 21-33, 1975.상
- [8] 山本賢三, 奥田孝美, "電離氣體", コロナ社, pp. 161-197, 1977.
- [9] 武田進著, "プラズマの基礎", 朝倉書店, pp. 17-58, 1976.
- [10] 森正武, "Fortran 77 數値計算 プログ ラミング" (岩波書店), pp. 41-44, 1995.
- [11] 몬테칼로法 と シミュレーション(培風館), 1989.
- [12] 市川行和, 高柳和夫, 島材勲, "衝突の理論(上下)", 吉岡書店, pp. 192, 1975.
- [13] 高柳和夫, "電子, 原子, 分子の衝突", 培風館, pp. 51-69, 1978.
- [14] J. H. S. W. Massey & E. H. S. Burhop, "Electronic and Ionic Impact Phenomena 1", Clarendon Press, Oxford, pp. 175, 1969.
- [15] L. B. Loeb, "Recent Advances in Basic Processes of Gaseous Electronics 1", University of California Press, pp. 162, 1973.
- [16] 하성철, 전병훈, 백승권, "몬테 칼로법을 이용한 Ar기체의 전자수송계수에 관한 연구", 전기전자재료학회지, Vol. 8, No. 6, pp.685-692, 1995.
- [17] 유희영, 하성철 등 "e⁻ - CF₄ 산란의 전자 이동 속도 및 특성에너지 연구" 한국전기전자재료학회, 추계학술대회 발표논문, 광운대학교, 1996