

이온 온도 방정식이 포함된 고밀도 유도결합 플라즈마원 수송 시뮬레이션을 위한 모델 및 경계 조건 비교

권득철, 유동훈, 이종규, 윤남식, 김정형*, 신용현*
 충북대학교, *표준과학연구원

Comparison of models and boundary conditions in fluid simulation of high density Inductively Coupled Plasma Sources included ion temperature equation

Deuk-Chul Kwon, D. H. Yu, J. K. Lee, N. S. Yoon, J. H. Kim*, Y. H. Shin*
 Chungbuk National University, *Korea Research Institute of Standards and Science

Abstract - 여러 그룹의 연구 결과로서 고밀도 유도결합 플라즈마원 유체 수송 시뮬레이션을 위해 다양한 경계 조건을 포함한 여러 가지 모델이 제시되어 왔다. 본 연구에서는 가능한 모델들과 경계 조건을 설정하여 FDM(finite difference method), up wind scheme, power-law scheme, dielectric relaxation scheme[1]을 기반으로한 1차원 시뮬레이션을 통해 정확성과 수치 해석적 안정성 및 효율성 면에서 비교, 검토하였다.

수 있으며 본 연구에서도 이러한 방법들은 공통적으로 적용되었다.

2. 본 론

전자 및 이온 등의 하전 입자 수송에 대한 모델식은 유체 방정식과 프와송 방정식으로 구성되며, 전자와 이온을 따로 모델링하는 Model I 과, 준중성을 가정해 이온에 대한 연속 방정식과 운동 방정식만으로 모델링하는 Model II가 이용된다.

1. 서 론

현대 산업계에 응용되고 있는 플라즈마 기술은 나날이 그 필요성이 증대되고 있어서, 반도체 제작, LCD 등의 디스플레이 장치 제작, MEMS, 표면 처리 등을 비롯한 여러 분야에서 응용되고 있다.

플라즈마는 전자에 에너지를 인가하는 전자 가열 과정과 에너지를 얻은 전자가 중성종과 충돌해 이온화하는 과정을 통해 발생한다. 이러한 플라즈마 발생 과정에 대한 이해를 위해서는 비선형적인 지배 방정식으로 인해 수치 해석적 시뮬레이션을 통한 해석이 요구된다. 하전 입자 수송 모델은 연구 목적에 따라 입자 시뮬레이션 (particle simulation), 운동 시뮬레이션(kinetic simulation), 유체 시뮬레이션(fluid simulation), 하이브리드 시뮬레이션(hybrid simulation) 등의 다양한 방법들이 응용되고 있는데, 플라즈마 발생과정에 대한 전반적인 조망에 가장 유용한 모델은 유체 시뮬레이션이다. 그러나 고밀도 플라즈마에 대해서는 플라즈마 주파수 ω_p 크고 sheath 길이가 장치 길이에 비해 매우 작기 때문에 안정적인 수치 해석적 해를 얻는 데에 어려움이 있다는 것이 알려져 있다. 따라서 이러한 수치 해석적 시간 및 공간 간격에 인가되는 강력한 제한을 극복하기 위해 여러 가지 모델과 수치 해석적 조건들이 이용되어 왔다. 하지만 제안된 여러 모델 및 경계 조건들은 정확성과 효율성 면에서 충분히 비교, 검토된 바가 없어 시뮬레이션에 가장 적합한 방법을 선택하기에 어려움이 있는 상황이다.

그러므로 본 연구에서는 모델과 경계 조건을 중심으로 여러 방법들을 정확성과 수치 해석적 안정성 면에서 비교하여 가장 효율적인 시뮬레이션을 제시하려 한다.

전자와 이온에 대한 하전 입자 수송 모델식은 유체 방정식과 프와송 방정식으로 구성되며, 크게 sheath를 포함하는 모델과 sheath를 따로 모델링하는 방법으로 구분할 수 있다.

일반적으로 공간 간격에 대한 안정성 제약은 upwind scheme[2]과 power-law scheme[3]등으로 극복할 수 있다는 것이 잘 알려져 있으며 시간 간격에 대한 제약은 massless electron 방법[4], semi-implicit 방법[5] 등이 제안되었고, 최근 연구에 의하면 dielectric relaxation 방법[1]이 massless electron 방법이나 semi-implicit 방법에 비해 효율적이라는 것이 밝혀졌다. 따라서 dielectric relaxation 방법, upwind scheme, 그리고 power-law scheme 등은 이미 널리 인정되고 있는 방법이라고 할

2.1 Model I : 준중성을 가정하지 않는 모델

일반적으로 전자 및 이온의 수송 모델은 다음과 같이 전자와 이온에 대한 연속 방정식, 운동 방정식, 온도 방정식, 그리고 프와송 방정식으로 주어진다[6].

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot (\Gamma_e) = R_e \tag{1}$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\Gamma_i) = R_i \tag{2}$$

$$\frac{\partial \Gamma_e}{\partial t} + \nabla \cdot (\Gamma_e v_e) = -\frac{en_e}{m_e} E - \frac{\nabla(n_e T_e)}{m_e} - v_{ex} \Gamma_e \tag{3}$$

$$\frac{\partial \Gamma_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\Gamma_i v_i) = \frac{en_i}{M_i} E - \frac{\nabla(n_i T_i)}{M_i} - v_{ix} \Gamma_i \tag{4}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2} n_e T_e \right) + \nabla \cdot \left(\frac{3}{2} n_e T_e v_e \right) + n_e T_e \nabla \cdot v_e + \nabla \cdot q_e = P_{ext} - P_{coll} \tag{5}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2} n_i T_i \right) + \nabla \cdot \left(\frac{3}{2} n_i T_i v_i \right) = -\nabla \cdot q_i - n_i T_i (\nabla \cdot v_i) + E_i \tag{6}$$

$$\nabla \cdot E = 4\pi e(n_e - n_i) \tag{7}$$

여기서 n_e 는 전자밀도이고 n_i 는 이온밀도, Γ_e 는 전자 플럭스, Γ_i 는 이온 플럭스이다. R_e 는 $v_{iz} n_e$ 으로, v_{iz} 는 이온화 충돌 주파수이다. v_e 는 전자 속도, v_i 는 이온 속도, m_e 는 전자 질량, 그리고 M_i 는 이온 질량이다. P_{ext} 는 공급된 파워, P_{coll} 은 충돌에 의한 파워손실, q_e 는 열 플럭스, 그리고 E_i 는 이온과 다른 종들의 충돌에 의한 에너지 전달이다. 전자 온도와 이온 온도에 대한 경계 조건으로는 널리 받아들여지고 있는 등온 조건을 공통적으로 설정하였다.

2.1.1 Case 1 : Sheath를 포함하는 모델, 이온 밀도를 속도의 보외법으로 결정하는 조건

정상 상태이고 sheath 영역에서 충돌이 없다는 가정하에서 이온 속도의 보외법을 통해 이온 밀도에 대한 경계 조건이

$$n_w = \frac{n_{w-1/2} v_{w-1/2}}{v_w}, \quad n_0 = \frac{n_{1/2} v_{1/2}}{v_0} \tag{8}$$

과 같이 표현될 수 있으며, 전자 밀도, 포텐셜, 플럭스 대한 경계 조건은

$$n_e = 0 \tag{9}$$

$$\phi = 0 \quad (10)$$

$$\frac{\partial \Gamma_e}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial \Gamma_e}{\partial z} = 0 \quad (11)$$

과 같이 설정될 수 있다.

2.1.2 Case 2 : Sheath를 포함하지 않는 모델 (sheath를 따로 모델링), Bohm sheath criterion을 기반으로 한 모델

Sheath에서 플럭스가 보존된다고 가정하며 벽에서 전자의 밀도는 sheath 전위차 만큼의 Boltzmann 인자로

$$n_{wall} = n_0 \exp\left(\frac{e\phi_f}{T_e}\right) \quad (12)$$

이다[7]. 여기서 n_0 는 sheath 입구에서의 밀도, ϕ_f 는 sheath 전위차이다. 그러므로 벽에서의 전자 플럭스는

$$\Gamma_{e,wall} = \frac{1}{4} n_0 \bar{v}_e \exp\left(\frac{e\phi_f}{T_e}\right) \quad (13)$$

이다. 그리고 Bohm sheath 모델에 의해 이온 플럭스는

$$\Gamma_{i,b} = n_0 v_B \quad (14)$$

이다. 여기서 v_B 는 Bohm 속도이다.

Sheath 모델은

$$\phi_f = \frac{T_e}{2e} \ln\left(\frac{M}{2\pi m_e}\right) \quad (15)$$

$$S = \frac{\sqrt{2}}{3} \lambda_D \left(\frac{2e\phi_f}{T_e}\right)^{3/4} \quad (16)$$

이다[7]. 여기서 S 는 sheath 길이, λ_D 는 Debye 길이이다.

2.2 Model II : 준중성을 가정한 pre-sheath 모델

준중성, 무질량(massless) 전자, 그리고 국부적인 쌍극성 확산(locally ambipolar diffusion)을 가정했을 때, $N \equiv n_i \approx n_e$ 이고 $v \equiv v_i \approx v_e$ 이다. 그러면 Model I에서의 유체 방정식이 플라즈마 영역에서 다음과 같이 표현될 수 있다[8].

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma = R_e \quad (17)$$

$$E = -\frac{1}{eN} \frac{\partial (NT_e)}{\partial z} \quad (18)$$

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \nabla \cdot (\Gamma v) = \frac{eN}{M_i} E - \frac{\nabla (NT_i)}{M_i} - v_{iN} \Gamma \quad (19)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2} NT_e \right) + \nabla \cdot \left(\frac{3}{2} NT_e v \right) + NT_e \nabla \cdot v + \nabla \cdot q_e = P_{ext} - P_{coll} \quad (20)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2} n_i T_i \right) + \nabla \cdot \left(\frac{3}{2} n_i T_i v_i \right) = -\nabla \cdot q_i - n_i T_i (\nabla \cdot v_i) + E_i \quad (21)$$

여기서 N 은 플라즈마 밀도, Γ 는 플럭스, 그리고 R_e 는 $v_{iz}N$ 으로, v_{iz} 는 이온화 충돌 주파수이다. v 는 플라즈마 속도, M_i 은 이온 질량이다. T_i 는 이온 온도이며 v_{iN} 은 이온-중성종 충돌 주파수이다. P_{ext} 는 공급된 파워, P_{coll} 는 충돌에 의한 파워 손실을 나타낸다.

2.2.1 Case 3 : Bohm sheath criterion을 기반으로 한 모델

Bohm sheath criterion을 적용한 모델로, 속도 및 플럭스는

$$v_b = v_B \quad (22)$$

$$\Gamma_b = n_b v_B \quad (23)$$

이다. 여기서 v_B 는 Bohm 속도이다.

Sheath 모델은

$$\phi_f = \frac{T_e}{2e} \ln\left(\frac{M}{2\pi m_e}\right) \quad (24)$$

$$S = \frac{\sqrt{2}}{3} \lambda_D \left(\frac{2e\phi_f}{T_e}\right)^{3/4} \quad (25)$$

이다. 여기서 S 는 sheath 길이, λ_D 는 Debye 길이이다.

3. 결 과

가장 효율적인 방법은 심각한 정확도의 훼손이 없는 한 시간 간격 Δt 와 공간 간격 Δz 를 가능한 한 큰 값으로 적용할 수 있는 모델일 것이다.

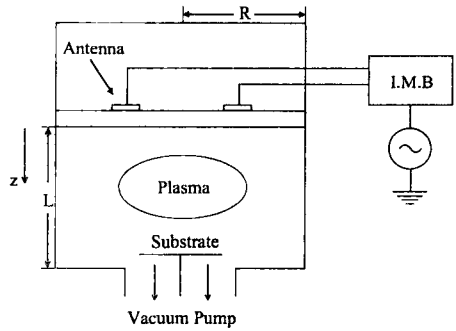


그림 1. 평판형 유도 결합 플라즈마원의 개략도

시뮬레이션은 평판형 유도 결합 플라즈마원의 Ar 플라즈마 방전에 대한 1차원 모델링(그림 1)[9]을 통해 2장에 제시된 여러 모델 및 경계조건에서 이루어졌다. 챔버의 반경 R 은 30 cm, 챔버의 길이 L 은 10 cm이다.

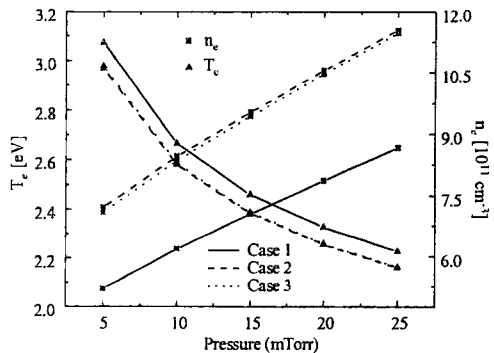


그림 2. 공간 평균한 전자 온도 및 밀도의 압력 의존성

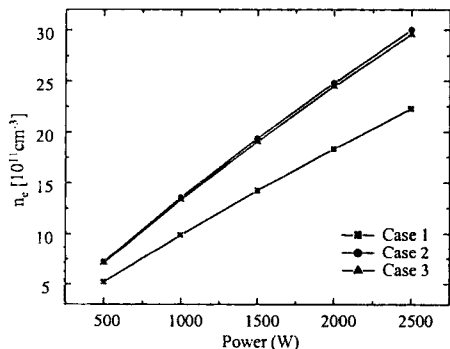


그림 3. 공간 평균한 전자 밀도의 파워 의존성

그림 2는 파워 500 W, 정상 상태에서 여러 압력에 대한 전자 밀도와 온도의 공간 평균값이다. 그리고 그림 3은 압력 5 mTorr, 여러 파워에 대한 정상 상태에서 전자 밀도의 공간 평균값이다. Case 2와 Case 3의 전자 밀도와 온도는 거의 일치하는 파워 및 압력 의존성을 보여주고 있다. sheath를 포함하는 모델 Case 1과 포함하지 않는 모델 Case 2,3 간의 차이가, 밀도는 36 % 이내, 전자 온도는 4 % 이내에 있다.

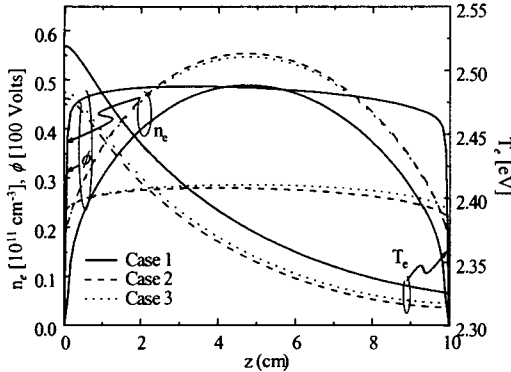


그림 4. 플라즈마 변수의 공간 의존성

그림 4는 파워 2 kW, 압력 15 mTorr에서 여러 경계 조건에 대한 플라즈마 변수의 공간 의존성으로, Case 2와 Case 3은 비슷한 공간 의존성을 보인다. 그러나 Case 1과 Case 2,3 간의 차이가, 전자 온도는 2 % 이내, 전자 밀도는 23 % 이내에 있으며, 그리고 포텐셜은 두 배가량의 차이가 있다.

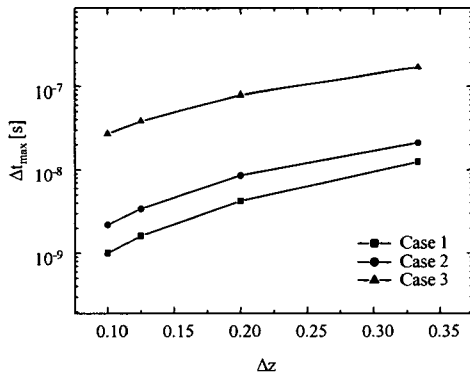


그림 5. 여러 경계 조건에서 Δz 에 대한 Δt_{max} 의존성

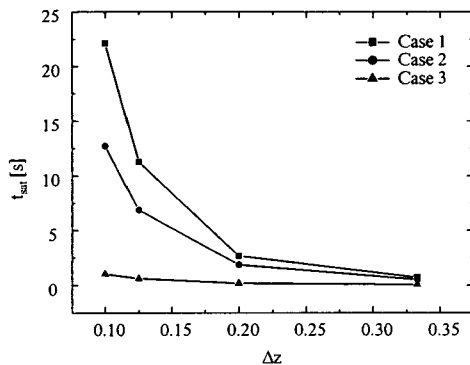


그림 6. 여러 경계 조건에서 Δz 에 대한 t_{min} 의존성

그림 5는 압력 5 mTorr, 파워 500 W에서 고정된 공

간 간격에 대해 최대 크기로 할 수 있는 시간 간격이고, 그림 6은 Δt 가 Δt_{max} 일 때, 정상 상태에 이르렀을 때의 시간(t_{sim})을 보인 것이다. Case 3의 조건이 다른 조건에 비해 정상 상태에 이르는 시간이 짧아 가장 효율적으로 시뮬레이션이 가능한 모델임을 확인할 수 있다.

준중성 pre-sheath를 가정하지 않고 sheath를 포함한 Case 1과 sheath를 따로 모델링한 Case 2, 그리고 준중성 pre-sheath를 가정한 Case 3을 비교해 보았다. Case 1의 경계 조건은 Case 2,3과 비교했을 때, 정확성에 차이가 있다. Case 3의 조건은 Case 2의 모델과 정확성 면에서 비슷한 경향성을 보이면서도 효율적인 계산을 수행할 수 있는 것으로 확인되었다.

4. 결 론

고밀도 유도결합 플라즈마 유체 수송 시뮬레이션을 위해 제시된 여러 경계 조건을 포함한 여러 가지 모델들이 1차원 시뮬레이션을 통해 정확성과 수치 해석적 안정성 및 효율성 면에서 비교, 검토되었다.

본 연구에서는 음이온이 포함되지 않은 단순 플라즈마에 대한 시뮬레이션을 통해 비교 검토하였지만, 음이온이 포함되는 복합 가스 방전에 대해서도 일반 sheath 모델이 적용된다면 크게 다르지 않은 결과를 보일 것으로 예상된다. 아울러 음이온이 포함된 경우의 모델 및 경계 조건 비교에 대한 연구가 현재 진행되고 있다.

감사의 글

본 연구는 과학재단 특정 연구개발 과제인 진공기술기반 구축 사업의 지원으로 이루어진 연구로서, 관계부처에 감사 드립니다.

[참 고 문 헌]

- [1] H. H. Choe, N. S. Yoon, S. S. Kim and D. I. Choi, "A New Unconditionally Stable Algorithm for Steady State Fluid Simulation of High Density Plasma Discharge", *Journal of Computational Physics* **170**, 550-561 (2001)
- [2] H. H. Choe, N. S. Yoon, "The Effect of Inertial Terms in the Momentum Equation in Fluid Simulation of High Density Plasma Discharge", *J. of Korean Phys. Soc.* vol. 42, s859-s866 (2003)
- [3] S. S. Kim, S. Hamaguchi, N. S. Yoon, C. S. Chang, Y. D. Lee and S. H. Ku, "Numerical Investigation on Plasma and Poly-Si Etching Uniformly Control over Large Area with a Modified Inductively Coupled Plasma Source", *Physics of Plasmas*, **8**, 1384 (2001)
- [4] R. A. Stewart, P. Vitello, and D. B. Graves, "Two dimensional fluid model of high density inductively coupled plasma sources", *J. Vac. Sci. Technol. B* **12**(1), 478 (1994)
- [5] T. J. Sommerer and M. J. Kushner, "Numerical investigation of the kinetics and chemistry of rf glow discharge plasmas sustained in He, N₂, O₂, He/N₂/O₂, He/CF₄/O₂, and SiH₄/NH₃ using a Monte Carlo fluid hybrid model", *J. Appl. Phys.* **71**, 1654 (1992)
- [6] 최덕인, *플라즈마 물리학과 핵융합*, 민음사, pp. 69-79, 1985
- [7] Michael A. Lieberman, Allan J. Lichtenberg, *Principles of Plasma Discharges and Materials Processing*, Wiley, pp. 154-163, 1994
- [8] N. S. Yoon, N. H. Choi, B. H. Park, and D. I. Choi, "One-Dimensional Fluid Model of ECR Discharge with Inhomogeneity Effects of External Magnetic Field", *IEEE Trans. Plasma Sci.* **23**, 609 (1995)
- [9] Deuk-Chul Kwon, D. H. Yu, J. K. Lee, N. S. Yoon, J. H. Kim, Y. H. Shin, "Model and boundary condition comparison in fluid simulation of high density Inductively Coupled Plasma Sources", 2004년도 대한전기학회 춘추대회 춘계학술대회 논문집. 65 (2004)