

CH₄ 기체의 전자에너지 분포함수 해석

김상남* 성낙진
시립인천전문대학

The Analysis of Electron Energy Distribution Function in CH₄ Gas

Sang-Nam Kim*, Nak-Jin Seong
Incheon city collage

Abstract

This paper describes the information for quantitative simulation of weakly ionized plasma. We must grasp the meaning of the plasma state condition to utilize engineering application and to understand materials of plasma state.

Using quantitative simulations of weakly ionized plasma, we can analyze gas characteristic. In this paper, the electron transport characteristic in CH₄ has been analysed over the E/N range 0.1~300[Td], at the 300[K] by the two term approximation Boltzmann equation method and Monte Carlo Simulation. Boltzmann equation method has also been used to predict swarm parameter using the same cross sections as input. The behavior of electron has been calculated to give swarm parameter for the electron energy distribution function has been analysed in CH₄ at E/N=10, 100 for a case of the equilibrium region in the mean energy.

The result of Boltzmann equation and Monte Carlo Simulation has been compared with experimental data by Ohmori, Lucas and Carter. The swarm parameter from the swarm study are expected to sever as a critical test of current theories of low energy scattering by atoms and molecules.

1. 서 론

최근에 Plasma CVD(Chemical Vapor Deposition) 기술에서는 SiH₄, SF₆, CF₄, CF₄+O₂, SiH₄+Ar, CF₄+N₂ 같은 분자들이 자주 사용되며 더 나은 프로세싱을 위해 플라즈마를 이해하고 디자인하기 위해 이러한 분자들에 대한 전자 충돌단면적의 정확

한 지식이 필요하게 되었다.[1] 따라서 전력 전송의 고전압 화, 대용량화 및 핵융합 등의 새로운 에너지 기술개발의 기초 과학 연구가 다각적으로 활발히 이루어지고 있는 추세이다. 한편 산업 발전에 따라 전력 계통의 대용량화, 송전 전압의 초고압화에 의하여 각종 전기 기기에 방전 현상이 증대한 영향을 미치게 되고 환경문제 등 여러 산업 분야에서 방전을 이용하려는 노력이 증가하고 있다. 따라서 기체 방전을 지배하는 Mechanism을 정확히 이해할 필요가 있으며 이를 위하여 이론적, 실

* 시립인천전문대학 전기과
(인천광역시 남구 도화동 235 Tel: 032-760-8704
E-mail : sn7332@hanmail.net)

험적 수치 해석적으로 많은 연구를 필요로 하고 있다[1]~[4].

이것은 전자 에너지 분포 함수를 갖는 전자군과 하전입자 군과의 충돌 현상으로 나타나는 전리 계수, 부착 계수 및 실효 계수 전자 이동 속도, 종·횡방향의 특성 에너지, 등의 전자 수송 특성의 실험적, 이론적 계산에 의하여 정량적으로 산출한다.

2. 해석방법

모나코의 카지노 게임도시인 Monte Carlo에서 이름이 유래된 몬테칼로법은 확률분포에 있어서 난수(Random Number) 선택에 기초한 실험적 수학의 한 분야로 불규칙적인 운동을 모델화 한 기법으로 매우 다양한 문제를 전자계산기에 발생시켜 Random한 실험결과를 해석하는데 유용한 수학적 모의 방법이다.[10]

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 시뮬레이션(MCS)으로는 H. Itoh, M. Musha 및 R. W. L. Thomas, W. R. L. Thomas 에 의해서 최초의 연구가 시작되었다[4]~[9].

MCS은 난수(Random Number)를 이용하여 충돌의 종류, 산란후의 방향 및 비행시간 등을 결정하면서 전자의 운동을 반복 추적한다. 또한 전자군의 성질을 조사하기 위한 몬테칼로 법은 전자계내의 전자 운동 상태와 분자의 충돌 산란 확률을 고려하여 전자, 이온의 상태량을 추적하는 것을 기본으로 하여 입자를 확률 현상의 난수로 모의하는 방법을 말한다. 사용하는 난수는 컴퓨터에서 발생하는 [0~1]사이의 의사난수(Pseudo random number)이다.

볼츠만 방정식은 MCS와는 다르게 개개의 전자를 추적하지 않고 처음부터 다수의 입자를 포함하는 전자류를 취급하기 위하여 충돌의 확률적 성질을 기초로 하여, 전자군의 연속적인 예측이 가능하고 계산시간이 비교적 짧아 각종 전자군 파라미터를 산출하는데 일반적으로 사용되어 왔다.

전리 기체 중에 존재하는 전자수송은 입자성분

을 위치와 속도 및 시간으로 나타내며 볼츠만 방정식은 열평형 상태가 아닌 경우에 전자가 운동 중 충돌에 의하여 임의의 속도와 임의의 위치에 존재하는 전자의 수가 시간에 따라 어떻게 변하는가를 추적, 결정하는 것이다.

전자군 시뮬레이션 결과는 FORTRAN77을 SPARC WORKSTATION을 이용하여 계산하였고, 그림 2.1은 전자 시뮬레이션 흐름도를 나타내었다.

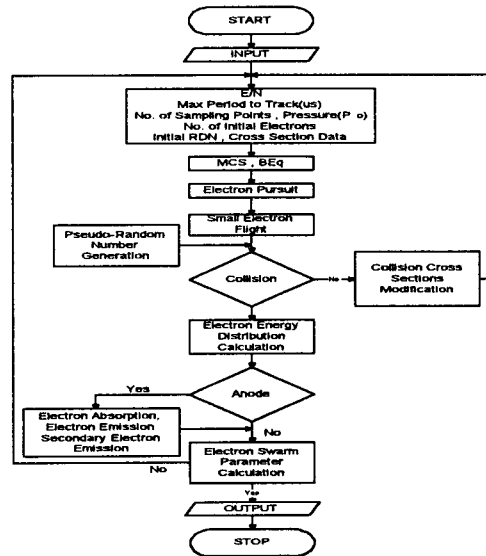


그림 2.1 전자 시뮬레이션 흐름도
Fig. 2.1 Flowchart of the electron simulation

3. 전자충돌 단면적

충돌단면적은 전자의 거시적 특성을 이해하는데 기초적 자료로서 중요하다. 가스절연재료 및 비평형 플라즈마 응용기술(광원, 레이저, 박막에칭, 방전화학, 환경보전, 정전기, 방사선검출기 등)에 이르기까지 각각의 경우에 필요한 가스의 종류, 상태 조건(E/N, 가스밀도, 여기조건 등)에 관계되는 여러 가지 전자특성에 관한 정보를 알 수 있다. 절연가스로 사용되는 경우는 여러 단면적중에 전리단면적(q_i)과 부착단면적(q_a)이 중요하며 에칭가스로는 여기단면적(q_{ex})과 해리단면적(q_d)이 중요하다.

전계를 인가한 기체분자에 대한 전자의 충돌 단면적은 전자에너지의 영향을 받는다. 그러므로 기체분자의 여기, 해리, 이온화 등의 반응을 여기단

면적, 해리단면적, 이온화단면적 등으로 나타내며 전충돌 단면적은 개개의 반응과정의 합으로 표현한다. 입자간의 상호충돌작용으로 나타난 기체분자의 운동량 변환단면적(q_m), 진동여기단면적(q_{v13} , q_{v24}), 전리단면적(q_i), 전자부착단면적(q_a), 해리단면적(q_d) 및 여기단면적(q_{ex}) 등이 있으며 본 논문에서 사용한 운동량변환단면적은 Crompton[3], Kitamori [4]과 Kline[10] 등에 의한 전자 Beam 실험값으로 구성되었다. 운동량변환단면적 q_m 은 비탄성 충돌을 위한 운동량 변환단면적으로 전체적인 운동량 변환단면적을 나타낸다.

전자부착단면적(q_a)은 실제적으로 그 값이 너무 작기 때문에 전자수송계수에 거의 영향을 주지 않는다. 해리 단면적에 대해서는 Winter[16]와 Kline, W.E. Bies의 실험결과치를 적용하였다..[17]~[18]

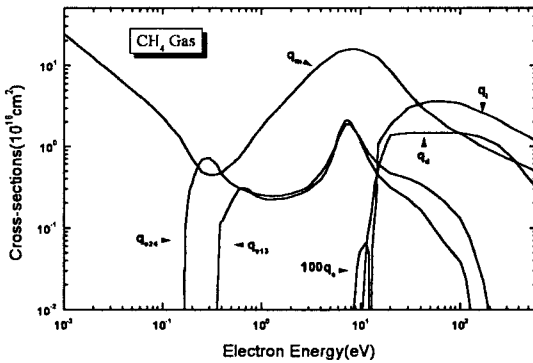


그림 3.1 CH₄기체의 전자충돌단면적
Fig. 3.1 Collision cross sections of electrons in CH₄

4. 결과 및 고찰

본 연구에서는 평형상태의 에너지를 이용하여 전자에너지 분포함수를 산출하였다. 따라서 전극간의 거리와 각각의 E/N : 10, 100[Td]의 평균에너지 변화량은 샘플링의 차에 의하여 음극과 양극에 가까운 영역에서는 증가하고 중심의 영역에서는 평형상태의 값을 나타낸다. 그림4.1과 그림4.2는 전자군 파라미터의 직접 관련되는 물리량인 전자에너지 분포함수를 나타내었다. 전계가 인가될 때 기체중을 이동하는 전자군의 에너지분포함수는 전자의 각각의 에너지에 대한 확률밀도, 전자와 분자사이

의 각종 충돌단면적과 방전현상으로 나타나는 전자수송특성에 직접 관련되는 물리량이다.[19]~[21]

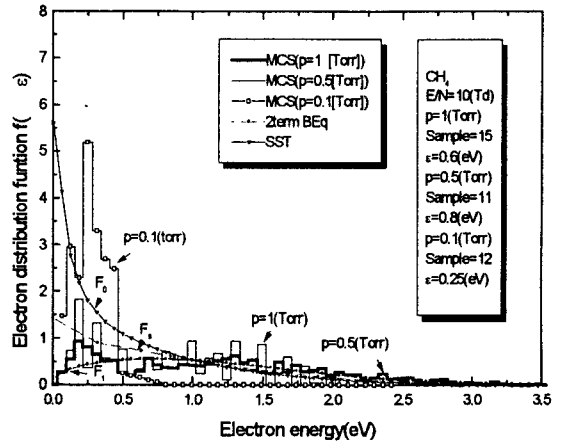


그림 4.1 CH₄가스중에서 전자에너지 분포함수
Fig. 4.1 Energy distribution function of electron in CH₄

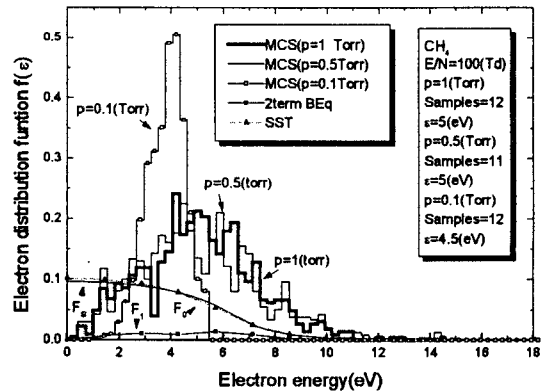


그림 4.2 CH₄기체중에서 전자에너지 분포함수
Fig. 4.2 Energy distribution function of electron in CH₄

하전입자는 여러 종류의 에너지성분을 갖는 기체분자가 열평형상태에 있는 경우에 에너지크기와 온도에 의존하는 방전공간의 등방적인 맥스웰-볼츠만 에너지분포함수이다. 전자에너지분포 $F(\epsilon)$ 를 E/N : 10, 100[Td]에 대하여 전자가 운동할 때 Sample(15, 12), 거리(1.5, 1.2cm), 평균에너지(0.6, 5 [eV]의 범위에서 MCS법으로 추적하여 전자에너지분포함수를 구하였다. $F(\epsilon)$ 의 초기 값에서는

전자에너지가 증가하고 높은 에너지 측에서는 감소하는 경향이 나타난다. 이러한 현상은 진동여기 충돌과 진동여기단면적의 공명효과 때문에 나타나는 것으로 생각된다. 한편 각각의 압력에 대한 분포함수의 수치는 평균에너지의 값에 대한 값과 일치하는 경향을 보이고 있음을 알 수 있다. 이것은 분포함수가 평균에너지를 하나의 변수로 함을 의미한다.

5. 결 론

CH₄ 가스 중 E/N : 0.1 ~ 300[Td]의 범위에서 MCS 와 BEq법에 의하여 전자에너지분포함수를 다음과 같은 결과를 얻었다.

1. E/N : 10, 100[Td]에 대한 전자에너지분포함수는 전충돌단면적을 사용하여 계산하였고 그 값으로부터 전자군 파라미터를 구하였다. 압력변화에 따른 전자에너지분포함수의 차이가 E/N [Td]와 전자의 평균에너지의 값에 따른 큰 영향이 나타남을 확인하였다.
2. 압력의 변화에 따른 평균에너지와 분포함수의 값은 이동속도를 변수로 하여 좌우되는 값으로 이동속도와 확산계수의 영향이 지배적이었다.

본 연구는 인천전문대학 교내 연구비 지원에 의한 논문임

참 고 문 헌

- [1] 山本,生田,“몬테칼로시ミュレーションによるCF₄카스의電子衝突 斷面積”, 電氣學會 放電研究會資料, ED-92-101, pp.71-80, 1992.
- [2] 菅野卓雄 “半導體 プラズ마 プロセス技術”産業圖書), pp.38-50, 1993.
- [3] Huxley L G H and Crompton R W 1974 The Diffusion and Drift of Electrons in gases (New York:Wiley) 1974
- [4] Y Ohmori, K Kitamori, H Tagashira " Boltzmann equation analysis of electron swarm behavior in Methane" The Institute of Physics. 437-455 1986
- [5] Rubinstein, L. " Simulation and Monte Carlo Method ", John Wiley, New York. 1981
- [6] H. Itoh and T.Musha "Monte Carlo Calculations of Motions in Helium", J.Phys. soc. Japan, Vol.15, No.9, pp.1675-1680, 1960.
- [7] 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.
- [8] 氣體放電 シミュレーション技法(제140호), 1974
- [9] 몬테칼로法和시ミュレーション(培風館),1989.
- [10] L. E. Kline, and W. E. Bies. "Measurements of swarm parameters and derived electron collision cross sections in methane", J.Appl. Phys. 65. 3311-3323. 1989.
- [11] 森正武. "Fortran77 數値計算 プログラミング"(岩波書店), pp.41-44, 1995.
- [12] 倉知正, "SiH₄-希가스混合氣體中における電子輸送係數に關する研究" 慶応義塾大學大学院理工學研究室 修士學位 論文, 1986.
- [13] Philip. E. Luft, "Description of a Backward prolongation program for computing transport coefficients", JILA. information center report, No.19, 1975.
- [14] Brian Chapman, "Glow Discharge Processes ", John Wiley & Sons, 1980.
- [15] 山本, 生田, "CF₄카스의電子衝突斷面積と輸送係數", 電氣學會放電研究會資料, ED-91-70, pp.11-20, 1991.
- [16] M. G. Curtis, Isobel C. Walker and K. J. Mathieson, "Electron Swarm Characteristic Energies(Dr/μ) in Tetrafluoromethane(CF₄) at Low E/N", IOP Publishing Ltd, pp.1271-1274, 1988.
- [17] 松村, 伊達, 田頭, 電氣學會放電研究會資料ED-92-97, pp.31-39, 1992.
- [18] Philip E. Luft, "Description of a Backward prolongation program for computing transport coefficients", JILA, Information center report, No.19, 1975.
- [19] S. R. Hunter, J. G. Carter. "Electron transport measurements in methane using an improved pulsed Townsend technique" J. Appl. Phys.60. 1986
- [20] G. N. Haddad "Low Energy Electron Collision Cross Sections for Methane" Aust. J. phys. 38. 677-85. 1985
- [21] J. W Coburn and H. F Winter. " Plasma etching-A discussion of Mechanisms"J. Vac. Sci Technol. vol. 16, pp. 391-403. 1979