

MCS-BEq 알고리즘에 의한 SiH₄ 기체의 전자수송특성

김상남*, 성낙진
시립인천전문대학

Characteristics of Electron Transport in SiH₄ Gas used by MCS-BEq Algorithm

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

Abstract - In this paper, energy distribution function in SiH₄ 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 SiH₄ 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.

The results show that the deduced electron drift velocities, the electron ionization or attachment coefficients, longitudinal and transverse diffusion coefficients and mean energy agree reasonably well with theoretical for a range of E/N values.

1. 서 론

최근에 각종 기체플라즈마를 사용한 반도체제조 프로세싱 기술이 많이 사용되고 있다. Plasma CVD 기술에서는 SiH₄, SF₆, CF₄, SiH₄+Ar, CF₄+N₂ 같은 분자들이 자주 사용되며[1], 그 중에서도 SiH₄ (monosilane) 가스는 플라즈마 CVD (Chemical Vapor Deposition)에 의한 Silicon 박막성형, 액정구동용 박막트랜지스터, 초LSI용 절연막, 반도체의 에칭 공정 및 기능성 박막의 생성 등 공업적으로 이용되고 있으며 그리고 이것은 라디오패(Radio Wave) 및 마이크로파(Micro Wave) 전계로 여기 시켜 전자와 SiH₄ 분자와의 충돌로 SiH₄ 분자의 해리반응을 거쳐 수소화 비정질실리콘(a-SiH)을 제조할 때 원료가스로 이용된다. [2,3,4].

따라서 이들에 관한 연구는 고속컴퓨터의 성능향상과 수치적 해석방법의 정교함으로 인하여 혁신적으로 전자군 파라미터 연구의 정확성과 신뢰성이 높은 영역까지 향상되고 있다. 본 연구에서는 전자의 비평형상태에서

SiH₄ 가스의 충돌단면적(q_m , q_v , q_a , q_i , q_d 등)을 Haller, Tossell 등이 결정한 값을 이용하여 E/N : 0.5~300[Td] [E:전계, N:기체분자수밀도, 1 Td = 1×10^{-17} V · cm², N : 3.5353×10^{16} cm⁻³ 0°C 1 Torr에 해당]와 압력 P₀ : 0.5, 1, 2.5[Torr] 범위에서 비등방성 산란을 고려하여 계산하고 그 결과를 Pollock [5], Ohmori, Cottell and Walker [6]의 실험값과 비교하여 전자수송특성을 고찰하였다. 그리고 전자충돌 단면적의 타당성에 대하여 검토하고 평균에너지에 따른 전자에너지분포함수를 볼츠만 방정식과 몬테칼로 시뮬레이션으로 계산한 전자수송특성을 해석하였다.

2. 해석 방법

몬테칼로법은 2차 대전 기간 동안에 원자단 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. Thomas에 의해서 최초의 연구가 시작되었다[7].

컴퓨터의 계산 성능이 향상됨에 따라 방전 공간 내에서 난수를 이용하여 각종 파라미터의 위치적 변동에 의해서 전자의 평균에너지와 전자위치 및 시간의 함수로서 추적하여 해석하는 몬테칼로법은 전자사태에서 나타나는 개개의 전자를 추적하여 방전 파라미터의 동향을 조사하여 이를 전자의 물리량을 가상적으로 샘플링하고 그들 하전입자의 운동을 컴퓨터로 분석하여 전자군의 파라미터의 값을 확률적으로 결정하는 것이다.

전계가 존재하는 공간의 방전 메카니즘에 있어서 전자는 전계에 의해서 높은 에너지를 갖게 되지만 전자에너지가 평형상태에 있지 않으므로 전자에너지분포를 추정하기는 매우 어렵다. 따라서 이러한 상태에서 전자에너지분포를 산출해내는데 몬테칼로 시뮬레이션은 매우 유용하다.

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 전자운동 상태와 분자의 충돌산란확률을 고려하여 전자, 이온의 상태량을 추적하는 것을 기본으로 하여 입자를 확률현상의 난수로

모의하는 방법을 말한다. 사용하는 난수는 컴퓨터에서 발생하는 [0~1]사이의 의사난수(Pseudo random number)이다[7]~[9].

MCS은 확률론적인 기법을 이용하기 때문에 얻어진 결과로 부터 통계적인 분산이 생기는 단점이 있다. 이 때문에 신뢰되는 파라미터를 구하기 위해서는 충분한 샘플수를 확보할 필요가 있다.

전자군에 대한 관측방법으로는 TOF, PT, SST 등이 있다. 몬테칼로 시뮬레이션에 있어서도 data 샘플링을 이들 관측법에 의해서 행한다. 3종의 관측법 중에 PT, SST에서는 계산을 행한 전자수가 그대로 샘플수로 생성되어 얻어지지만 TOF에서는 위치와 시간을 같이 지정하기 때문에 샘플수는 작게 된다. 더욱이 에너지 분포를 구하는 경우 샘플수는 점점 작게 되고 통계적 변동을 많이 포함한 결과가 되기 쉽다. 그것을 방지하기 위해 전자수를 많게 계산하는데 그것에 비례하여 계산기 시간도 증가한다.

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 전자 수송은 입자 성분을 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.

기체중의 방전현상을 원자론적인 입장에서 보면, 상호 충돌을 되풀이하는 하전입자 즉 전자, 원자, 분자, 이온에서 성립되며, 이들 하전입자는 전자군의 속도와 위치 및 시간에 따라 분류할 수 있는데, 하전입자가 열평형 상태에 있는 경우를 제외하고는 전자의 운동 중 충돌에 의한 임의의 속도와 임의의 위치에 있는 전자의 수가 시간에 따라 변화한다.

하전입자 각각의 속도는 각각 다른 시간 t 와 더불어 변화하므로 일반적으로는 위치공간과 속도공간을 일치시킨 위상공간과 분포함수 개념을 도입하여 위치벡터 $\vec{r} = (x, y, z)$, 속도벡터 $\vec{v} = (v_x, v_y, v_z)$, 시간을 t 로 놓았을 때, 전자의 위치 $\vec{r} - (\vec{r} + d\vec{r})$, 속도 $\vec{v} - (\vec{v} + d\vec{v})$ 의 범위에 있는 미소 공간에 존재하는 입자수를 dn 이라 하면

$$dn = f(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{r} \cdot d\vec{v} \quad \dots \dots \dots (1)$$

로 나타낼 수 있다.

여기에서 $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ 는 하전입자의 속도분포함수이다.

볼츠만 방정식을 간단히 정리하면 다음과 같이 정리 할 수 있다

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + \vec{a} \cdot \nabla_{\vec{v}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad \dots \dots \dots (2)$$

위 식에서 보면 전자군의 임의의 위치와 속도 및 시간을 갖는 전자수 밀도는 위치 변화에 따른 밀도와 전계의 속도 변화에 의한 밀도 그리고 충돌로 나타나는 속도 변화에 따른 밀도의 변화로 나타낼 수 있다는 것이다.

볼츠만 수송방정식은 열평형 상태가 아닌 경우 전자가 운동 중 충돌에 의한 임의의 속도와 임의의 위치에 따라 어떻게 변화하는가를 결정하는 것이다. 볼츠만에서는 몬테칼로 시뮬레이션과는 달리 개개의 전자를 추적하지 않고 처음부터 다수의 입자를 포함하는 전자류를 취급하기 위하여 충돌의 확률적 성질을 기초로 하여 전자군의 연속적인 관찰이 가능하다. 따라서 전자군의 운동과정을 명확히 규명할 수 있으며 이들의 여러 가지 파라미터를 정량적으로 해석하는 경우 비교적 짧은 시간으로 전산 처리하여 구하는 것이 가능하다[10].

이러한 전자수송현상을 이해하기 위해서는 기체의 전자 충돌 단면적을 알아두어야 할 필요가 있다.

3. 전자충돌 단면적

본 연구에 이용한 SiH₄의 전자 충돌 단면적은 Haller[10], Tossell[12]의 값을 이용하여 계산하였고 그림 3.1에 나타내었다.

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

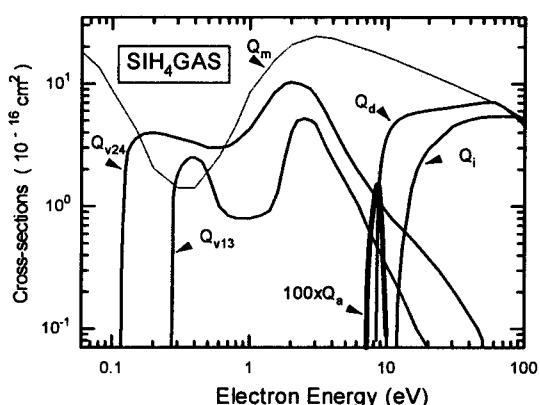


그림 3.1 SiH₄가스의 전자충돌단면적
Fig. 3.1 Collision cross section of SiH₄ gas

4. 결과 및 고찰

4.1 전리계수

본 연구에서는 60[Td]이하에서는 전리가 일어나지

않았다. 그리고 압력이 1[Torr] 일 때는 계산 값과 실험값이 거의 일치하였으나 압력이 높아질 때는 E/N : 150[Td]이상에서 급격히 전리계수의 압력의존성이 나타남을 볼 수 있다. 이것은 기체압력의 증가에 수반되는 전동여기상태에 있는 SiH₄ 분자의 밀도가 증가되는 것으로 판명된다[7].

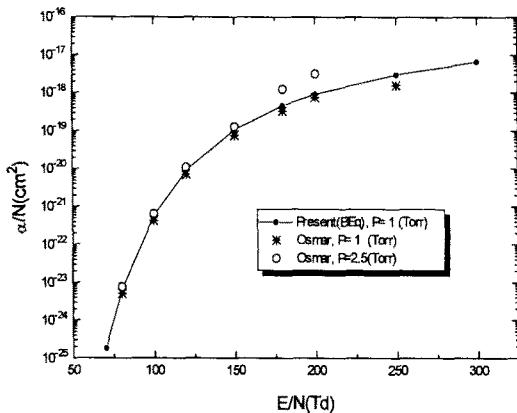


그림 4.1 SiH₄가스에서 전리계수
Fig. 4.1 Ionization coefficients in SiH₄ gas

4.2 평균에너지

전자의 평균에너지(\bar{e})는 전극간거리 및 시간의 함수로써 계산되는 전자에너지분포, 전자이동속도 등에 관계되

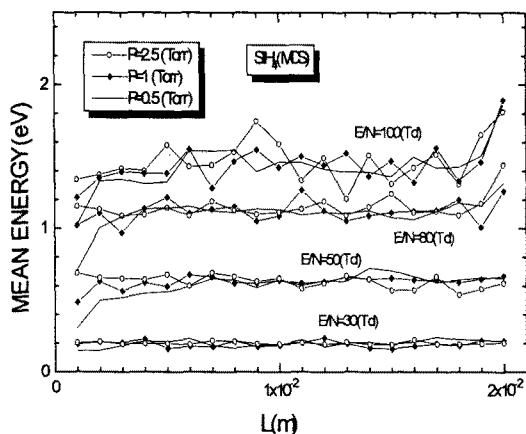


그림 4.2 SiH₄가스에서 전자의 평균에너지
Fig. 4.2 Mean energy of electron in SiH₄ gas

는 물리량이다. 전극면에서의 전자운동의 증가는 음극의 에너지가 양극으로 이동하고 양극에서는 반사나 음극으로 방출된 2차 전자가 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 그림8에 나타냈으며 샘플링

의 차에 의하여 음극과 양극 가까운 영역의 전자의 평균에너지는 영점으로부터 비탄성충돌이 일어날 에너지까지는 직선적으로 상승하여 비평형의 상태로 나타나고 그 외 영역에서는 거의 평형상태의 에너지 값을 나타내었다.

4.3 에너지 분포함수

전자에너지분포 F(e)는 그림4.3과 4.4에서 탄성 및 비탄성충돌을 고려하여 E/N = 30, 50[Td] 및 압력 P : 0.5, 1, 2.5[Torr]에 대하여 나타내었다. 그림에서

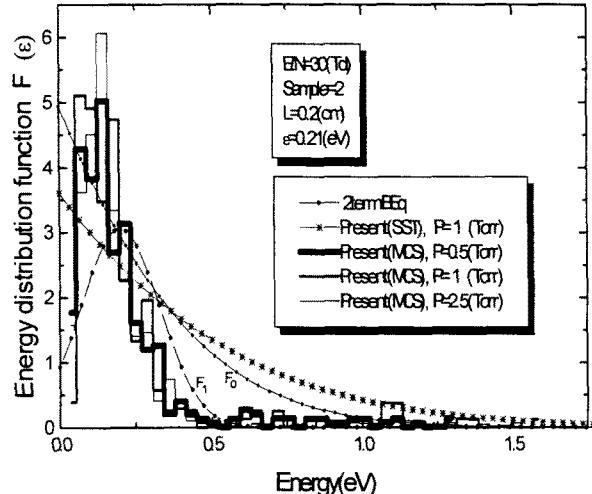


그림 4.3 SiH₄가스에서 전자에너지 분포함수
Fig. 4.3 Energy distribution function of SiH₄ gas

나타나듯이 MCS로 추적하여 나타난 전자에너지분포는 비평형상태로 이때의 평균에너지 값이 각각 \bar{e} : 0.21[eV], \bar{e} : 0.64[eV], Sample(2, 16), 거리(0.2, 1.6[cm])로 BEq[8]법과 SST[8]법의 계산법과 전반적으로 차이를 나타내었다. 또한 여기로 인하여 전자의 에너지를 잃어버리는 것이 크면 비평형영역도 크게 나타난 것으로 생각된다.

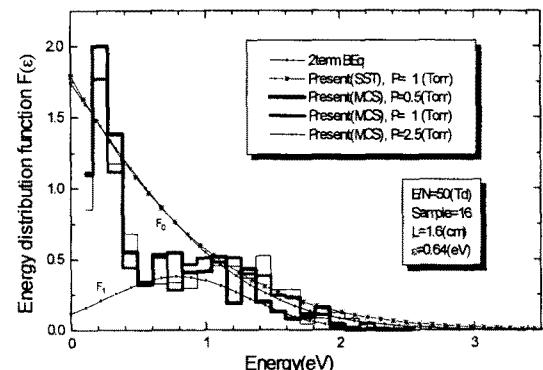


그림 4.4 SiH₄가스에서 전자에너지 분포함수
Fig. 4.4 Energy distribution function of SiH₄

5. 결 론

본 논문에서는 SiH_4 가스의 전자충돌단면적을 이용하여 $E/N: 0.5 \sim 300[\text{Td}]$, 압력 $P: 0.5, 1, 2.5[\text{Torr}]$ 범위에서 방전파라미터의 특성을 비평형 상태에서 몬테칼로 시뮬레이션과 볼츠만 방정식으로 해석한 결과 다음과 같은 결론을 얻었다.

1. 종방향 확산 계수(N_{D}^{L})는 Q_m 에 Ramsauer minimum을 가진 가스들의 독특한 특징을 나타내었으며 $E/N[\text{Td}]$ 의 증가에 따른 의존성이 크게 작용하고 있음을 예측할 수 있었다.
2. 전자특성에너지(D_{L}/μ)는 $E/N: 1.5 \sim 60[\text{Td}]$ 영역에서는 실측치와 거의 일치하였으나 $E/N: 60 \sim 300[\text{Td}]$ 에서는 여기와 전리충돌의 반응으로 비탄성충돌 작용이 일어나고 있음을 예측할 수 있다. 그리고 특성에너지(D_{T}/μ)에서는 실측치와 $E/N: 2 \sim 40[\text{Td}]$ 범위에서 일치하였으나 그 외 영역에서의 다소 차이를 보인 것은 이동도($\mu = V_d/E$)의 산출에 적용한 이동속도가 다르기 때문인 것으로 예측할 수 있다.
3. $E/N: 30, 50[\text{Td}]$ 에 대한 전자에너지 분포함수는 전충돌단면적을 사용하여 계산하였고 그 값으로부터 전자군 파라미터를 계산하였다. 그리고 전자여기나 전리 등의 비탄성충돌과 진동여기 단면적의 공명 효과 때문에 방전파라미터의 특성에 큰 영향이 나타남을 알 수 있었고 압력변화에 따른 전자에너지 분포함수의 차이는 $E/N[\text{Td}]$ 와 전자의 평균에너지의 값에 따라 큰 영향이 나타남을 확인하였다.

이처럼 컴퓨터를 이용한 시뮬레이션으로 MCS법과 볼츠만법에 의한 결과 값은 실험값과 거의 일치하는 것으로 최근에 공학적으로 유효한 수단이 되고 있으며 우수한 프로그램이라는 것이 입증됨으로써 실험에 드는 비용 및 시간을 크게 절약할 수 있고 SiH_4 플라즈마를 이용한 기판가공 기술, 반도체의 박막 공정, 플라즈마 에칭기술, Plasma CVD의 활용 및 기초적인 물성data를 얻는데 크게 기여할 것으로 판단되어진다.

본 연구는 인천전문대학 교내 연구비 지원
에 의한 논문임

[참 고 문 헌]

- [1] Stephen M. Rossnagel, Jerome J. Cuomo, William D Westwood, "Handbook of Plasma Processing Technology", Noyes Publications, 1990.
- [2] 대상의행, 하처광부, 전두박소, "SiH₄ 가스의 전자충돌단면적および スウオ-ム ペラメ-タ" 전기학회연구회자료,

- ED-86-114, HV-86-34, 1988.
- [3] 관야탁옹 편저, "반도체플라즈마프로세스기술", 산업도서, pp.38-50, 1993.
 - [4] 소소광청 저 "プラズマと成膜の基礎", 일간공업신문사, pp.13-20, 1993.
 - [5] Pollock W.J., "Momentum Transfer and Vibrational Cross-sections in Non-polar Gases" Trans. Faraday Soc., 64, pp.2919-2926, 1988.
 - [6] Cottrell T.L., Walker, I. C "Electron collision cross sections for the monosilane molecule" Transc. Faraday Soc. 61, pp.1583-1593, 1965.
 - [7] 電氣學會技術報告書, "氣體放電シミュレーション技法" 第140號, 1974.
 - [8] 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.
 - [9] Philip. E. Luft, "Description of a Backward prolongation program for computing transport coefficients", JILA, information center report, No.19, 1975.
 - [10] Philip. E. Luft, "Description of a Backward prolongation program for computing transport coefficients", JILA, information center report, No. 19, 1975.
 - [11] C. Jacoboni and P. Lugli, "The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation", Springer-Verlagien, pp.1-4, 1989.
 - [12] 전기학회기술보고, "기체방전シミュレーション 기법", 제140호, 1974.
 - [13] 전전효부, "モンテカルロ法とシミュレーション", 배풍관, 1969.
 - [14] Haller I, "Importance of chain reactions in the plasma deposition of hydrogenated amorphous silicon" J.vac.Sci Technol. A, pp. 1376-1382, 1983.
 - [15] M. Kurachi, Y. Nakamura "Electron collision cross sections for the monosilane molecule", J.phys.D: Appl. phys.22, pp.107-112, 1987.
 - [16] Tossell J. A. "MS-X α calculation of the elastic electron scattering cross sections and X-ray absorption spectra of CX₄ and SiX₄ (X=H, F, Cl)" J.chem.Phys, pp.813-821, 1984.