

## RF/마이크로웨이브 방전에서의 전자에너지 분포함수의 결정

고육희† · 박인호\* · 김남춘\*

한서대학교 물리학과, \*인천대학교 물리학과  
(논문접수일 : 2001년 5월 14일)

### Determination of electron energy distribution functions in radio-frequency (RF) and microwave discharges

Wook Hee Koh†, In Ho Park\*, and Nam Choon Kim\*

*Department of Physics, Hanseo University*

*\*Department of Physics, University of Incheon*

(Received May 14, 2001)

#### 요 약

RF나 마이크로웨이브의 전기장이 작용될 때 플라즈마 방전에서의 전자에너지분포함수를 계산하기 위하여 전자 볼츠만 방정식을 수치적으로 푼다. 2차미분 방정식인 로렌츠근사를 사용하는 동차 전자 볼츠만 방정식과 적분-미분방정식인 입자균형방정식을 동시에 풀어 자체모순이 없게 방전 전기장의 크기를 결정한다. 이 수치코드를 이용하여 아르곤 방전에 대하여 전자에너지 분포함수를 RF와 마이크로파영역에 걸쳐 계산한다. 이로부터 전자에너지 분포함수와 이온화율에 대한 고주파 전기장의 주파수 변화에 따른 영향을 조사한다.

#### Abstract

An electron Boltzmann equation is solved numerically to calculate the electron energy distribution functions in plasma discharge which is generated by radio-frequency (RF) and microwave frequency electric field. The maintenance field strengths are determined self-consistently by solving the homogeneous electron Boltzmann equation in the Lorentz approximation expressed by 2nd order differential equation and an additional particle balance equation expressed by integro-differential equation. By using this numerical code, the electron energy distribution functions in argon discharge are calculated in the range from RF to microwave frequency. The influence of frequency of the HF electric field on the electron energy distribution functions and ionization rate are investigated.

#### 1. 서 론

RF나 마이크로웨이브 방전을 이용하여 발생된 플라즈마는 박막증착 및 에칭 그리고 레이저 여기 등의 여러 산업 분야에 널리 활용되고 있다. 이러한 고주파(HF) 가스 방전에 대한 이온화 및 수송 현상에 대한 물리적 성질을 이론적으로 연구하는 것은 효

과적인 방전 플라즈마를 생성하기 위하여 필수적인 일이다. HF 방전에 대한 이론적 연구에서 기초적이고 중요한 문제는 전자에너지분포함수(electron energy distribution function; EEDF)를 계산하는 일이다. EEDF는 전자의 밀도가 충분히 큰 경우에는 거의 Maxwellian 분포로 나타나지만 [1], 전자의 밀도가 낮은 경우에는 Maxwellian으로부터 벗어나게 된다. [2,3]

† E-mail : whkoh@hanseo.ac.kr

본 논문에서는 전자밀도가 충분히 크지 않아서 Maxwellian 분포로 근사할 수 없는 경우에 대하여 HF 방전의 수치적 모델링을 제시하고, 이를 통해 EEDF를 계산한다. EEDF는 Lorentz 근사와 얇은 원통 근사(thin cylinder approximation) [4,5]를 사용하여 얻어진 동차 볼츠만방정식을 풀어 결정하며, 볼츠만 방정식을 풀기 위해서 필요한 HF 전기장의 세기는 벽에서의 경계조건을 만족하도록 얻어진 정상상태에서의 입자 균형방정식(particle balance equation)을 동시에 풀어 자체 모순이 없는 방법으로 결정한다.

본 모델에서 플라즈마 내의 전하들은 양쪽극 확산(ambipolar diffusion)을 한다고 가정하였으며, 전자밀도가 충분히 크지 않아 전자-전자간의 충돌현상이 지배적이지 아닌 경우를 고려하는 것으로 전자-중성간의 충돌(탄성 및 비탄성 충돌)만을 고려하였다. e-e충돌등을 고려하지 않았기 때문에 본 모델은 매우 간단하다. 하지만 동차 볼츠만 방정식을 자체 모순이 없게 계산하는 모델로 짧은 시간동안 비교적 정확히 EEDF를 계산할 수 있다.

이 수치코드를 이용하여 아르곤가스 방전에 대하여 전자에너지 분포함수를 RF와 마이크로파영역에 걸쳐 계산하며, 이로부터 전자에너지 분포함수와 이온화율에 대한 고주파 전기장의 주파수 변화에 따른 영향을 조사한다.

## 2. 볼츠만 방정식의 수치적 해법

### 2.1 볼츠만 방정식

간단화된 동차의 볼츠만 방정식을 풀어 EEDF를 구하기 위해서 몇 가지 가정을 한다. 즉, 전자에너지 분포의 비등방성이 매우 작아 분포함수를 구면 조화함수들의 두 항 전개로 표시하는 것이 가능하며(Lorentz 근사), 충돌주파수가 충분히 커서 HF 장의 한 주기동안 분포함수의 등방성 항이 거의 변화되지 않으며, 또한 공간 전하에 의한 전기장은 매우 작아 무시할 수 있어 균일한 고주파 전기장이 작용된다고(얇은 원통 근사) 가정한다.

이 때 전자분포의 볼츠만 방정식은 아래와 같이 쓸 수 있다. [5]

$$\frac{d}{du} \left[ \frac{2}{3} u^{3/2} \nu_m(u) u_c \frac{df(u)}{du} \right] + \frac{d}{du} \left[ u^{3/2} \nu_m(u) \frac{2m}{M} f(u) \right] - [u^{1/2} \nu_x(u)] f(u) = 0 \quad (1)$$

$$u_c = \frac{e}{m} \frac{1}{\nu_c^2(u) + \omega^2} \frac{E_p^2}{2} \quad (2)$$

여기서  $u_c$ 은 한 주기동안 충돌에 의해 전달되는 평균에너지를 나타내며,  $\nu_m$ 는 전자와 중성입자 사이에서의 운동량전달 충돌주파수(momentum transfer collision frequency)를 나타내는 것으로  $\nu_m^2 = N^2 (\sigma_m^2 2eu/m)$ 이고,  $\sigma_m$ 는 전자와 중성입자간 운동량전달 충돌단면적(collision cross section), 그리고  $N$ 은 중성원자들의 밀도를 나타낸다.  $\nu_x$ 는 전자와 중성입자사이의 총 비탄성충돌 주파수(total inelastic collision frequency), 그리고  $E_p/\sqrt{2}$ 은 유효 전기장의 세기,  $\omega$ 는 전기장의 주파수이다. 충돌은 전자와 중성가스입자사이의 충돌(e-n충돌)만을 고려하였으며, 전자에너지분포함수  $f$ 는 아래와 같이 규격화(normalize)된 것이다.

$$\int_0^\infty f(u) u^{1/2} du = 1 \quad (3)$$

식 (1)의 미분방정식을 풀어 EEDF를 구하려면  $E_p$ 와  $\omega$ 가 주어져야 한다. 그러나 EEDF의 모양 또한  $E_p$ 의 값에 영향을 준다. 따라서 EEDF를 정확히 계산하기 위해서는 두 양을 동시에 결정하는 자체 모순이 없는 풀이법으로 이 방정식을 풀어야 한다.

### 2.2 입자균형 방정식

정상상태에서 이온화로 인해 생성된 하전입자들은 양쪽극 확산(ambipolar diffusion)을 통하여 플라즈마 챔버의 벽으로 확산되어 가며, 그곳에서 소멸하게 된다. 이와 같이 입자들의 생성과 손실에 대한 균형을 나타내는 연속방정식은 아래와 같이 쓸 수 있다.

$$\langle \nu_i \rangle = \frac{D_a}{\Lambda^2} \quad (4)$$

여기서  $\langle \nu_i \rangle = NC_i$ 로 평균 이온화주파수(ionization frequency) 이고,  $C_i$ 는 전자이온화비율계수(electron rate coefficient for ionization)로  $C_i = \langle \sigma_i v \rangle$ 이며,  $\sigma_i$ 는

전자의 충돌에 의한 이온화단면적(ionization cross section) 이고,  $\langle \nu \rangle$  는 EEDF에 대한 평균을 취한 것을 의미한다. 즉,  $\langle \nu_i \rangle$  는 아래와 같이 나타낼 수 있다.

$$\langle \nu \rangle = \int_0^\infty \nu_i(u) f(u) \sqrt{u} du \quad (5)$$

양쪽극확산계수  $D_a$ 와 자유확산계수(free diffusion coefficient)  $D_e$ 는 아래와 같이 나타낼 수 있다.

$$D_a = \frac{D_e \mu_i + D_i \mu_e}{\mu_i + \mu_e}$$

$$D_e = \frac{2e}{3m} \int_0^\infty \frac{u^{3/2}}{\nu_m(u)} f(u) du \quad (6)$$

여기서  $\mu_e$ 는 전자의 mobility로

$$\mu_e = -\frac{2e}{3m} \int_0^\infty \frac{u^{3/2}}{\nu_m(u)} \frac{df(u)}{du} du \quad (7)$$

이고,  $\mu_i$ 는 이온의 이동도(ion mobility)로  $\mu_i = e/M\nu_{in}$  이고, 이온 확산계수  $D_i = kT_i/M\nu_{in}$ 이며,  $\nu_{in}$ 은 이온과 중성가스간의 충돌주파수이다.

전기장의 세기  $E_p$ 가 위치에 무관하게 주어질때 반경  $a$ 인 긴 원통형 방전튜브에 대하여  $\Lambda = a/2.405$ 로 나타낼 수 있다. 또  $\mu_e \gg \mu_i$  이므로  $D_a \approx \mu_i u_k$ 로 근사시킬 수 있으며, 여기서  $u_k$ 는  $u_k = D_e/\mu_e$ 로 전자특성에너지(electron characteristic energy)를 나타낸다.  $\mu_{\bar{d}} N = \mu_{\bar{d}} N_L$  ( $\mu_{\bar{d}}$ 는 reduced 이온이동도,  $N_L$ 은 Loschmidt수)이므로 식 (8)은 아래와 같이 다시 쓸 수 있다.

$$C_i(f) = \frac{\mu_{\bar{d}} N_L}{(N\Lambda)^2} u_k(f) \quad (8)$$

여기서  $u_k$ 와  $C_i$ 는 EEDF에 의존하지만  $C_i/u_k$ 의 비는  $N\Lambda$ 의 곱의 함수(또는  $pa$ 의 곱)로 EEDF에 무관하게 된다.

### 2.3 수치적 방법

식 (1)의 볼츠만 방정식을 풀어 EEDF를 구하기 위해서는 충돌주파수, 즉 충돌단면적을 알아야 한다. 아르곤 가스에 대한 충돌단면적은 그림 1과 같다. [6,7]

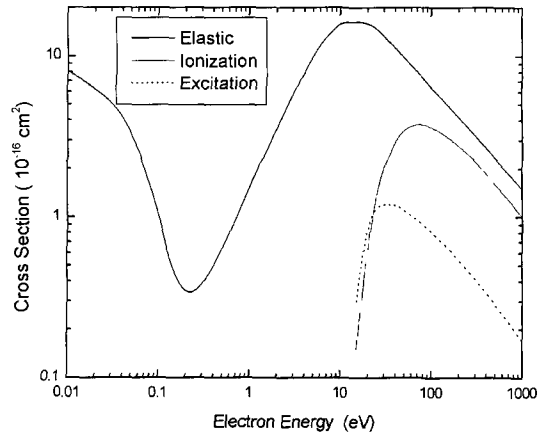


그림 1. Elastic, ionization, and excitation cross sections for e-n collisions in Ar.

이 충돌단면적을 간단하게 모델링하여 나타내면 아르곤에 대한 운동량전달단면적(momentum transfer cross section)과 총 비탄성단면적(total inelastic cross section)은 각각 다음과 같이 쓸 수 있다 [2,3].

$$\sigma_m = \begin{cases} a_c \frac{u}{V_x} & \text{for } u \leq V_x \\ a_c \left(\frac{u}{V_x}\right)^{-1/2} & \text{for } u > V_x \end{cases} \quad (9)$$

$$\sigma_x = \begin{cases} 0 & \text{for } u \leq V_x \\ a \left(\frac{u}{V_x}\right)^{-1/2} \left(\frac{u}{V_x} - 1\right) & \text{for } u > V_x \end{cases} \quad (10)$$

여기서  $a_c = 1.59 \times 10^{-19} m^3$ ,  $a = 1.56 \times 10^{-20} m^2$ 이다.

식 (1)을 수치적으로 풀기 위해서 유한차분법(finite difference method; FDM)을 사용한다. 유한차분법을 사용하기 위하여 식 (1)을 간단히 나타내면 아래와 같다.

$$\frac{d}{du} \left( P \frac{df}{du} \right) + \frac{d}{du} (Qf) + Rf = 0 \quad (11)$$

여기서

$$P(u) = \frac{2}{3} u^{3/2} \nu_m(u) u_c(u)$$

$$Q(u) = u^{3/2} \nu_m(u) \frac{2m}{M}$$

$$R(u) = -u^{1/2} \nu_x(u) \quad (12)$$

이다.

에너지 축을 0 에서부터  $i_{MAX}$ 까지 너비  $h$ 의 등 간격으로 나누어 주면 각 점  $i=0,1,2,\dots,i_{MAX}$  에서의 에너지는  $u_i = ih$ 으로 주어지며, 식 (11)을 유한차분법으로 나타낸 방정식은 아래와 같다.

$$(Q_{i-1} - 2P_{i-1/2})f_{i-1} + [2(P_{i+1/2} + P_{i-1/2}) + 2h^2R_i]f_i - (hQ_{i+1} + 2P_{i+1/2})f_{i+1} = 0 \quad (13)$$

이 방정식은 삼각대각행렬(tridiagonal matrix)로 표현되며, 경계조건을 주면 풀 수 있는 것으로 경계조건은  $u=\infty$ 에서  $f(u)=0$ 와 표준화조건  $\int_0^\infty f(u)u^{1/2}du = 1$ 로 줄 수 있다.

식 (5)의 균형방정식은 Simpson 알고리즘을 이용하여 수치적 적분식으로 나타내고, 식 (13)과 동시에 풀어  $E_p$ 와  $f$ 에 대한 해를 자체모순이 없게 결정할 수 있다.

### 3. 계산 결과 및 고찰

식 (1)의 볼츠만 방정식과 식 (8)의 균형방정식의 두 방정식을 동시에 만족하게 자체모순이 없는 방법으로 풀면 전자에너지분포함수를 얻을 수 있다.

그림 1은 아르곤 가스에 대하여 EEDF를 수치적으로 계산한 결과들이다. 아래의 모든 계산에서 방

전 튜브의 반경은  $a=1.4cm$ , 축 방향으로의 길이는 매우 길다고 가정하였다.

그림 2는  $p=100$  mTorr 일때의 EEDF를 계산한 결과이다. 마이크로파 전기장의 주파수가 0인 경우(DC인 경우)와 60 MHz인 두 경우에 대한 전자에너지 분포함수이다. 그림에서 점선으로 표기된 직선들은 각각 DC인 경우( $\omega=0$ )와 60 MHz의 주파수 일 때의 경우와 평균운동에너지가 같은 경우의 Maxwellian을 표시한 것으로  $x$ 축과  $y$ 축 둘 다를 로그스케일로 표기했기 때문에 그림에서처럼 직선으로 보인다. DC와 MW(microwave) 두 경우에 대하여 EEDF의 모양이 상당히 다른 것을 볼 수 있으며, 특히 꼬리부분과 꼬리부분의 전자의 수가 많이 다른 것을 볼 수 있다. 여기서 꼬리부분이라는 것은 아르곤 가스의 여기문턱에너지(excitation threshold energy) 11.55 eV 보다 더 높은 에너지 영역을 말한다. 두 경우에 대한 전자의 온도를 eV 단위로 나타내면 각각 3.71 eV, 2.29 eV이다. 여기서 전자온도  $T_e$ 는  $\frac{2}{3}\langle u \rangle$ 로 나타내진다. 주파수가 높은 경우의 전자온도가 더 낮은 것을 알 수 있는데, 그 이유는 그림을 보면 알 수 있듯이 EEDF 꼬리부분에서의 전자분포가 DC의 경우보다 마이크로웨이브의 경우가 더 적다는 것에 기인된다.

그림 3은 압력이 그림 2의 2배로 증가하였을 때의 EEDF를 계산한 결과를 보여준다. 그림 1과 비교

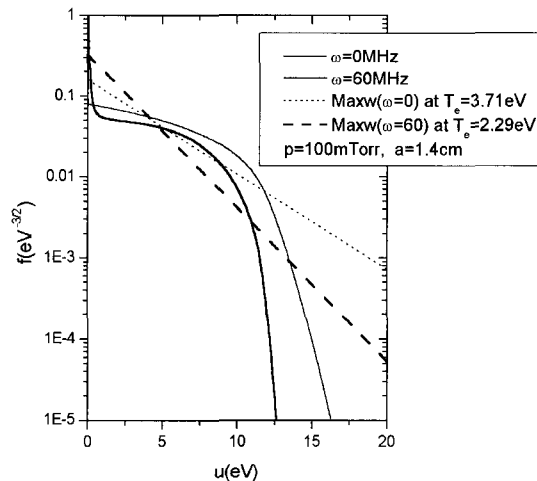


그림 2. Electron energy distribution function(EEDF) at  $p=100$  mTorr.

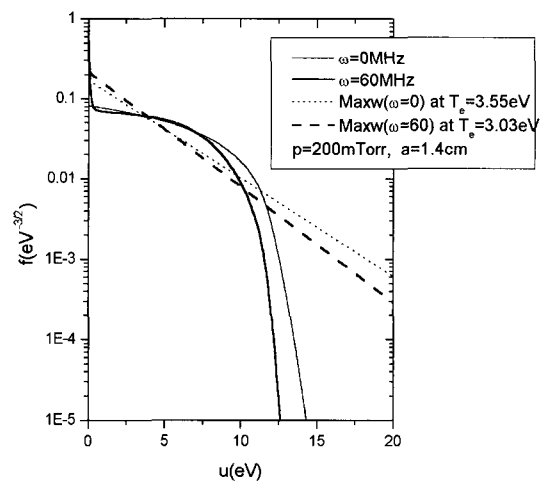


그림 3. Electron energy distribution function(EEDF) at  $p=200$  mTorr.

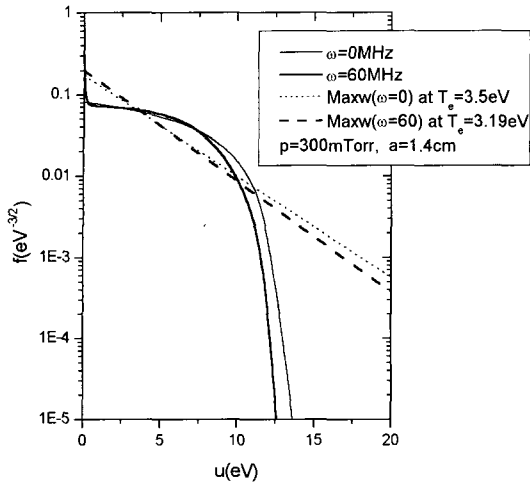


그림 4. Electron energy distribution function(EEDF) at p=300 mTorr.

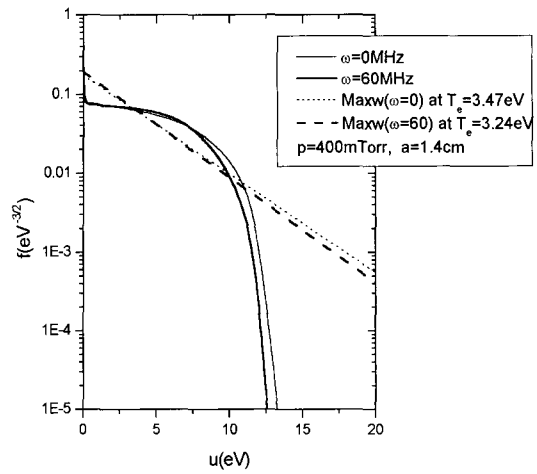


그림 5. Electron energy distribution function(EEDF) at p=400 mTorr.

해보면 EEDF의 모양의 차이가 그림 2의 경우보다 상당히 줄어 있는 것을 알 수 있다. 또한 DC의 경우는 압력이 높아지면 전자의 운도가 3.71 eV에서 3.55 eV로 낮아지는 것을 볼 수 있고, 반면 MW의 경우에는 2.29 eV에서 3.03 eV로 DC의 경우와는 반대로 오히려 높아지는 것을 알 수 있다.

그림 4와 그림 5는 압력이 각각 300 mTorr와 400 mTorr인 경우에 대한 EEDF를 계산한 결과이다. 낮은 압력의 경우들에 비하여 EEDF의 모양이 더 유사해지는 것을 볼 수 있다. 그림 2에서 그림 5까지를 비교하면 압력의 증가와 더불어 DC와 MW의 경우에 대한 EEDF의 모양의 차이가 점점 감소하고 있다는 것을 볼 수 있다. 또 DC의 경우에는 압력의 증가에 따라 평균운동에너지가 감소하고 MW의 경우에는 평균운동에너지가 증가하는 것을 알 수 있다.

그림 6은 마이크로웨이브 주파수의 변화에 따른 EEDF의 의존성을 보기 위하여 압력 100 mTorr에 대하여 주파수를 0에서부터 2.45 GHz까지 증가시키면서 EEDF를 그린 그림이다. DC에서 MW로 주파수가 증가함에 따라 낮은 에너지의 전자의 수는 증가하고 높은 에너지의 전자의 수는 상대적으로 감소하는 것을 알 수 있다.

그림 7은 그림6과 마찬가지로 압력이 일정할 때 주파수의 변화에 따른 EEDF를 그린 그림으로 그림 6보다 압력이 4배 높을 때 EEDF의 계산 결과이다.

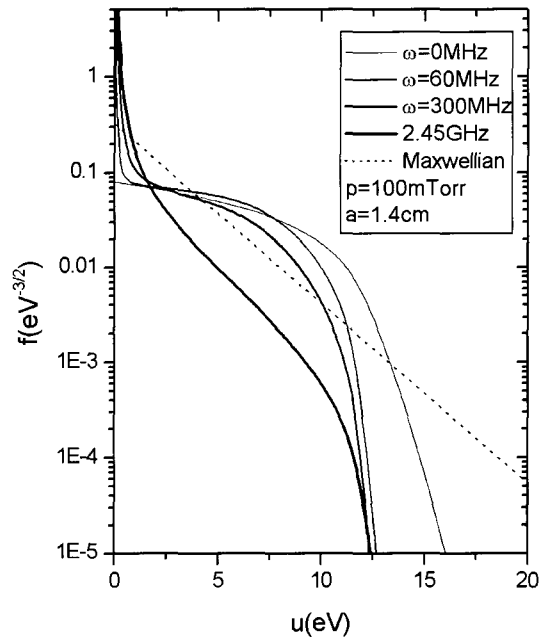


그림 6. EEDF for a variation of  $\omega$  at p=100 mTorr.

중성가스 압력의 증가로 인해 EEDF들 사이의 모양의 격차가 압력이 낮은 경우보다 현저히 감소하고 있음을 알 수 있다. 이 경우 역시 그림 6의 경우와 마찬가지로 주파수의 증가에 따라 몸체부분의 전자 농도는 증가하고 꼬리부분의 전자농도는 감소함을 볼 수 있다. 이는 주파수가 높아질수록 전자의 충돌

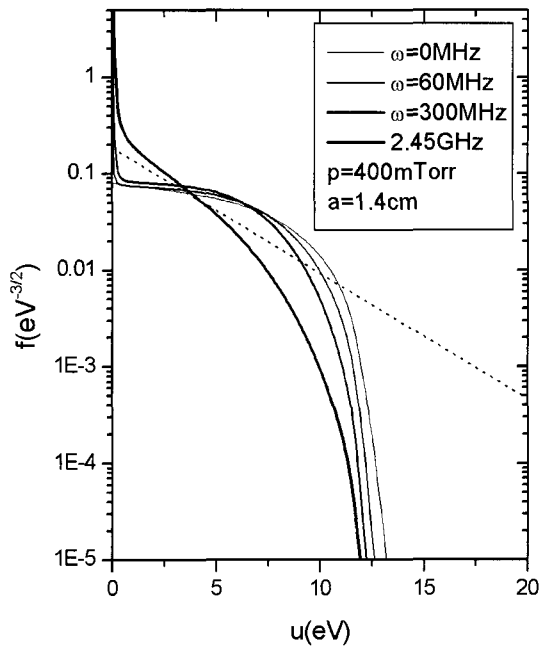


그림 7. EEDF for a variation of  $\omega$  at  $p=400$  mTorr.

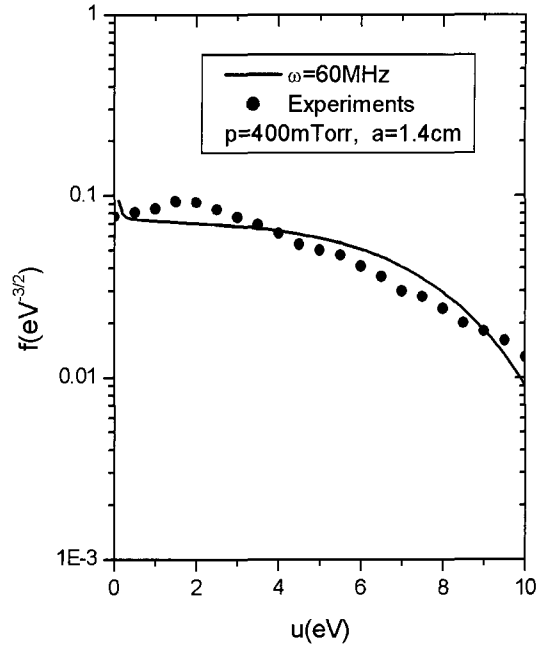


그림 8. Calculated EEDF in comparison with measured values at  $p=400$  mTorr.

표 1. Ionization rate coefficients.

pa(Torr-cm)	DC	60 MHz	300 MHz	2.5 GHz
0.15	1	0.207	0.036	0.007
0.6	15.5	0.255	0.059	0.039

로 인한 이온화정도가 점점 감소한다는 사실로부터 기인한다. 이는 표 1의 이온화율계수(ionization rate coefficient)  $C_i$ 를 보면 보다 분명히 알 수 있다. 이온화율계수는 DC의 경우가 MW의 경우보다 더 높게 나타나는데, 이는 같은  $pa$  값에 대하여 전자 하나당 마이크로웨이브로부터 흡수되는 평균에너지는 MW의 경우가 DC의 경우보다 더 작다는 말이다. EEDF로부터 계산된 이온화율계수  $C_i$ 는 이미 언급한 바와 같이 주파수의 증가에 따라 점차 감소함을 알 수 있다. 표 1에서 계수의 단위는 상대적 크기를 비교하기 위하여  $pa=0.15$  Torr cm의 DC의 경우에 대한 비로 표시하였다.

이와 같은 결과는 MW의 전자의 특성에너지가 DC의 전자특성에너지보다 더 작기 때문에 즉,  $u_k^{MW} < u_k^{DC}$  이기 때문에 플라즈마 챔버의 벽으로 도망가는 전자의 수가 MW의 경우가 DC의 경우보다 더 적기

때문이다. 그렇기 때문에 방전을 유지하기 위해 필요한 이온화율이 작아지며, 이것은 이온화에 참여하는  $u \geq V_i$  이상의 전자의 비율이 작아도 됨을 의미한다. 지금의 경우 이것은 비탄성충돌의 비율을 작게 만들기 위하여 전자분포함수의 꼬리 부분 전체의 감소를 통해 이루어진다.

그림 8은 압력이 400 mTorr인 경우에 대한 EEDF를 계산한 결과와 측정치 [8]를 비교한 그림이다. 그림에 나타난 결과는 전영역에 걸쳐 계산치와 측정치가 거의 일치하는 것을 볼 수 있다. 이 결과는 본 코드의 타당성을 말해주는 것으로 본 모델은 고주파 플라즈마의 이해 및 여러 고주파 플라즈마 장치들의 최적화를 위한 파라메타의 산출을 위한 계산 등에 이용될 수 있다.

#### 4. 결 론

RF나 마이크로파 방전 플라즈마의 특성을 해석하기 위하여 Lorentz 근사를 사용한 볼츠만 방정식을 풀기 위하여 고주파 방전에 대한 수치적 모델링을 제시하였다. 플라즈마 튜브는 긴 원통형이고, 하전입자들은 양쪽극확산(ambipolar diffusion)을 한다

고 가정하였으며, 전자밀도가 충분히 커지지 않는다면 전자-전자간의 충돌현상은 지배적이 아니므로 이 경우 전자-중성간의 충돌(탄성 및 비탄성 충돌)만을 고려 할 수 있다.

정상상태의 HF 전기장의 세기를 구하기 위하여 정상상태에서의 입자 균형방정식(particle balance equation)과 볼츠만 방정식을 동시에 풀어 자체모순이 없게 EEDF를 결정하였다.

아르곤 기체에 대하여 압력 및 HF 전기장의 주파수를 변화시키면서 EEDF를 계산하였으며, 이로부터 주파수의 변화가 EEDF와 이온화율에 미치는 효과를 보였다.

### 참 고 문 헌

- [1] C.M. Ferreira and J. Loureiro, J. Phys. D: Appl. phys. **16**, 1611 (1983).
- [2] C.M. Ferreira and J. Loureiro, J. Phys. D: Appl. phys. **16**, 2471 (1983).
- [3] C.M. Ferreira and A. Richard, J. Appl. Phys. **54**, 2261 (1983).
- [4] M. Moisan, Z. Zakrewski, *Radiative Processes in Discharge Plasma*, ed. J. M. Proud and L. H. Luessen, Plenum, New York, 1986.
- [5] D. J. Rose and S. C. Brown, Phys. Rev. **98**, 310 (1955).
- [6] S.C. Brown, *Basic Data of Plasma Physics*, p. 22 (1966).
- [7] U. Kortshagen, H. Schluter and A. Shivarova, J. Phys. D: Appl. phys., **24**, 1571 (1991).
- [8] U. Kortshagen and H. Schluter, J. Phys. D : Appl. Phys. **24**, 1585 (1991).