

논문 15-1-12

전자군 방법에 이용되는 2항근사와 다항근사 볼츠만 방정식의 적용

An Application of Two-term and Multi-term Approximation of Boltzmann Equation to Electron Swarm Method

하성철^{*}, 전병훈^{**}

(Sung-Chul Ha^{*} and Byung-Hoon Jeon^{**})

Abstract

An accurate cross sections set is necessary for the quantitatively understanding and modeling of plasma phenomena. By using the electron swarm method, we determine an accurate electron cross sections set for objective atoms or molecule at low electron energy range. It is general calculation that used in this method to an two-term approximation of Boltzmann equation. But it may give erroneous transport coefficients for CF₄ molecule treated in this paper having 'C_{2v} symmetry', therefore, multi-term approximation of the Boltzmann equation analysis which can consider anisotropic scattering exactly is carried out.

It is necessary to require understanding of the fundamental principle of analysis method. Therefore, in this paper, we compared the electron transport coefficients(W and ND_L) in pure Ar, O₂, and CF₄ gas calculated by using two-term approximation of the Boltzmann equation analysis code uses the algorithm proposed by Tagashira *et al.* with those by multi-term approximation by Robson and Ness which was developed at James-Cook university, and discussed an application and/or validity of the calculation method by comparing these calculated results

Key Words : Electron collision cross sections set, Two-term approximation of the Boltzmann equation, Multi-term approximation of the Boltzmann equation, W, ND_L

1. 서 론

일반적으로 전자군 방법에 이용되는 볼츠만 방정식 기법에는 2항근사와 다항근사 두 가지 기법이 있다. 우리는 이 두 가지 기법 중 가장 보편적이고 계산시간이 비교적 짧은 2항근사 기법을 이

용해 왔다. 그러나 한 분자가스가 가지고 있는 단면적 특성 상 낮은 에너지 범위에서 탄성충돌단면적 보다 큰 비탄성충돌단면적, 특히 진동여기 단면적을 가지고 있는 가스의 경우(예를 들어 CF₄분자가스) 2항근사 볼츠만 기법을 이용하여 정확한 그 분자가스의 전자수송계수의 해석 및 단면적 결정은 어려움을 가지고 있다. 따라서 본 논문에서는 낮은 에너지 범위에 탄성충돌단면적만이 존재하는 Ar가스와 비슷한 에너지 범위에 탄성충돌단면적과 비탄성충돌단면적(특히 진동여기단면적)이 공존하고 있는 O₂분자가스, 그리고 앞에서 기술한 CF₄분자가스, 이렇게 세 가지 가스를 모델로 하여 적절

** : 중부대학교 정보공학부 전기전자공학과
(충남 금산군 추부면 마진리 산2-25,
Tel & Fax : 041-750-6655
E-mail :bhjeon@joongbu.ac.kr)
* : 동국대학교 전기공학과
2001년 9월 29일 접수, 2001년 10월 31일 1차심사완료
2001년 11월 15일 2차심사완료

한 볼츠만 방정식 기법의 적용을 소개하고자 한다.

2. 볼츠만 방정식 해석

기체 중에서 하전입자군의 수송계수를 측정하는 방법에는 2항근사와 다항근사 볼츠만 방정식 해법, 몬테칼로 시뮬레이션 기법과 같이 3가지 방법이 있다. 여기서 TOF(time of flight) 샘플링 방법을 이용하여 가스들의 전자수송계수들을 산출하는데 이용한 2항근사와 다항근사 볼츠만 방정식은 열평형 상태에서가 아닌 다입자계(多粒子系)운동의 기술에 이용해 이것을 전자군의 거동해석에 이용하고 있다. 볼츠만 방정식에서는 전자의 거동을 분포함수라는 거시적인 형태로 표시하고, 이 분포함수에서 전자수송계수를 산출한다.

2.1 2항근사 볼츠만 방정식

전자의 속도분포함수를 Legendre 급수로 전개하고, 그 최초의 2항에 근사하는 2항근사는 전자수송계수를 산출하기 위한 소요시간은 비교적 짧은데 비해, 전자의 속도분포함수에 비등방성이 강한 경우에는 정확한 계수를 산출할 수 없는 단점을 가지고 있다.

최초의 전자의 연속식은 Thomas[1]에 의해 식 (2-1)로 주어졌고,

$$\frac{\partial n(z, t)}{\partial t} = R_A(z, t)n(z, t) - \frac{\partial}{\partial z} W(z, t)n(z, t) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} D(z, t)n(z, t) \quad (2-1)$$

여기서 전자의 전리 및 부착충돌을 고려한 전자의 연속식은 Tagashira *et al.*[2]에 의해 식 (2-2)로 나타내며, 역변환에 의해 식 (2-3)을 얻을 수 있다. 여기서 $n(\epsilon, z, t)$ 는 전자에너지분포함수이다.

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^\epsilon n(\epsilon', z, t) d\epsilon' = R_C + R_E + R_Z \quad (2-2)$$

$$\begin{aligned} n(\epsilon, z, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(isz) \exp(-\omega(s)t) H(\epsilon, s) ds \\ &= \left(F_0 + F_1 \frac{\partial}{\partial z} + F_2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \dots \right) \times \\ &\quad \left[\exp\left(\sum_{k=3}^{\infty} (-1)^k \omega_k t \frac{\partial^k}{\partial z^k} \right) \right] \times \exp(\omega_0 t) \\ &\quad \left[\frac{1}{(4\pi\omega_2 t)^{1/2}} \exp\left(-\frac{(z-\omega_1 t)^2}{4\omega_2 t} \right) \right] \end{aligned} \quad (2-3)$$

식(2-1)~(2-3)의 관계로부터 시간 t 에 의한 전

자수와 각각의 전자수송계수는 다음과 같이 구할 수 있다.

<전자수>

$$n(t) = \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty n(\epsilon, z, t) dz d\epsilon = \exp(\omega_0 t) \quad (2-4)$$

<전자이동속도>

$$\begin{aligned} W_r &= \frac{\partial z'(t)}{\partial t} = -\frac{V_1 E}{3N} \int_0^\infty \frac{\epsilon}{Q_T} \frac{\partial}{\partial \epsilon} (F_0 \epsilon^{-1/2}) d\epsilon \\ &+ (\omega_0 A_1 - \omega_{01}) \end{aligned} \quad (2-5)$$

<종축확산계수>

$$\begin{aligned} D_L &= \frac{1}{2!} \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^\infty [z - z'(t)]^2 p(z, t) dz = \frac{V_1}{3N} \times \\ &\quad \left(E \int_0^\infty \frac{\epsilon}{Q_T} \frac{\partial}{\partial \epsilon} (F_1 \epsilon^{-1/2}) d\epsilon + \int_0^\infty \frac{\epsilon^{1/2}}{Q_T} F_0 d\epsilon \right) \\ &- (\omega_0 A_2 - \omega_1 A_1 - \omega_{02}) \end{aligned} \quad (2-6)$$

<횡축확산계수>

$$D_T = \frac{V_1}{3N} \int_0^\infty \frac{\epsilon^{1/2}}{Q_T} F_0 d\epsilon + (\omega_0 A_1 - \omega_{01}) \quad (2-7)$$

<전자평균에너지>

$$\bar{\epsilon} = \int_0^\infty \epsilon F_0 d\epsilon \quad (2-8)$$

2.2 다항근사 볼츠만 방정식

전자에서 분자(M)와 전자(m)의 질량 비가 1보다 상당히 작기 때문에, $m/M \ll 1$, 단지 탄성충돌만이 일어나는 속도공간 내에서의 전자분포함수는 거의 등방성으로 작용하므로 2항근사는 구면조화(Spherical Harmonic)로 표현할 필요가 있다. 이에 Kumar *et al.*[3]은 구면조화에서의 분포함수의 표현을 다음과 같이 나타내고 있다.

$$f(v, r, t) = n(r, t) \sum_{l=0}^{l_{max}} \sum_{m=-l}^l f_m^{(l)}(v) Y_m^{(l)}(\theta, \phi) \quad (2-9)$$

여기서, $f_m^{(l)}(v)$ 는 텐서(tensor)계수, $Y_m^{(l)}(\theta, \phi)$ 는 구면조화이며, $l_{max}=1$ 일때 2항근사로 주어진다. 따라서 $l_{max} \gg 2$ 일때를 다항근사라 하며, 이 다항근사 기법은 Robson and Ness[4]에 의해 급진적으로 발전되어졌다. 그들은 전자속도분포함수를 Legendre와 Sonine 급수로 전개하였고, 전자수송계수들은 다양한 Legendre 다항식 l 과 Sonine다항식 ν 에 의해 다음과 같은 수밀도에서의 연속식으로부터 구하고 있다.

$$\partial_t n = -an - W \partial_z n + D_T (\partial_x^2 + \partial_y^2) n + D_L \partial_z^2 n \quad (2-10)$$

여기서 a 는 부착계수, W 는 전자이동속도, D_L , D_T 는 종축확산, 횡축확산계수를 나타내고 있고, 각각의 전자수송계수는 다음과 같이 나타내고 있다.

<부착계수>

$$\alpha = 4\pi \int_0^\infty J_R^{(0)}[\mathcal{A}(00|00)]v^2 dv \quad (2-11)$$

<전자이동속도>

$$W = i \left[\frac{4\pi}{3} \right]^{1/2} \int_0^\infty v^3 \mathcal{A}(10|00) dv - i\sqrt{4\pi} \int_0^\infty v^2 J_R^0[\mathcal{A}(00|11)] dv \quad (2-12)$$

<종축확산계수>

$$D_T = \left[\frac{4\pi}{3} \right]^{1/2} \left[\int_0^\infty v^3 \mathcal{A}(11|11) dv + \int_0^\infty J_R^0(\mathcal{A}(00|20) + \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathcal{A}(00|20))v^2 dv \right] \quad (2-13)$$

<횡축확산계수>

$$D_L = - \left[\frac{4\pi}{3} \right]^{1/2} \left[\int_0^\infty v^3 \mathcal{A}(10|11) dv + \int_0^\infty J_R^0(\mathcal{A}(00|20) - \sqrt{2}(\mathcal{A}(00|22))v^2 dv \right] \quad (2-14)$$

3. 전자충돌단면적

본 논문에서 모델로 이용된 Ar, O₂ 그리고 CF₄ 분자가스의 전자충돌단면적을 그림 1~3에 나타내었다. 이들 충돌단면적은 전자의 특성을 파악하는 기초자료로서 상당히 중요하며, 각각의 단면적(특히 낮은 에너지 범위에 있는 운동량변환단면적과 진동여기단면적)의 구조적 특성은 본 논문에서 논하고자하는 2항근사와 다항근사 볼츠만 방정식의 적용을 이해하는데 많은 도움이 되리라 보여진다.

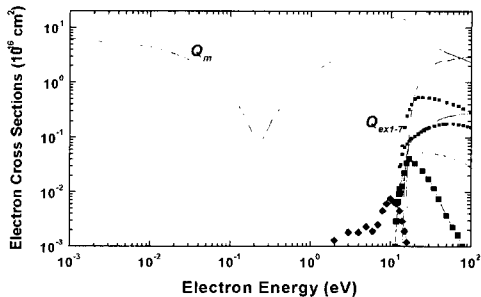


그림 1. Ar가스의 전자충돌단면적.
Fig. 1. The set of electron collision cross

sections for Ar atom.

그림 1에서 보여지는바와 같이 Ar 원자가스[5]는 낮은 에너지 영역(0.2 eV 부근)에 Ramsauer Townsend Minimum(RTM)[5]을 갖고 있는 탄성충돌단면적 Q_m 만이 존재하고, 그림 2의 O₂분자가스[6]는 같은 에너지 영역에 큰 값을 갖는 탄성충돌단면적 Q_m 과 회전(Q_{rot}) 및 진동여기($Q_{v's}$)의 비탄성충돌단면적으로 구성되어 있다.

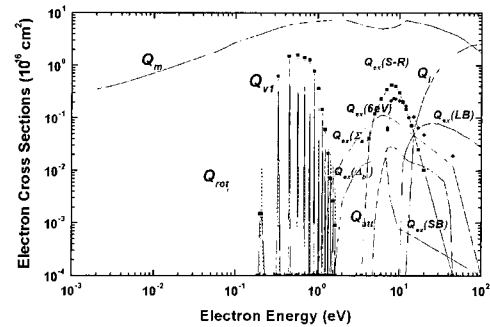


그림 2. O₂가스의 전자충돌단면적.
Fig. 2. The set of electron collision cross sections for O₂ molecular.

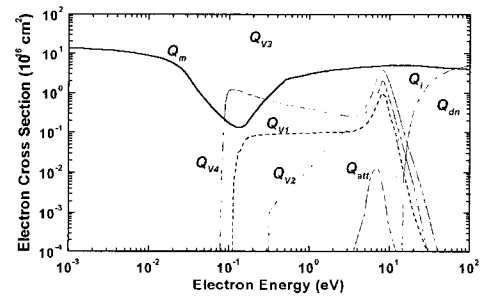


그림 3. CF₄가스의 전자충돌단면적.
Fig. 3. The set of electron collision cross sections for CF₄ molecular.

그림 3의 CF₄분자가스[7]는 Ar의 Q_m 에서 보여주는 RTM과 O₂가스에서 보여주는 Q_v , Q_{ex} 등의 여러 단면적으로 구성되어있으며, 이 분자가스의 두드러진 특징은 RTM이 보여지는 0.18 eV 부근에서 커다란 진동여기충돌현상이 일어나는 것이다.

따라서 이렇게 구성요소가 각각인 세 개의 단면적을 모델로 2항근사 및 다항근사 볼츠만 방정식

을 이용하여 계산된 전자수송계수(W와 ND_L)에서의 특징을 살펴보고, 그 적용을 이해하고자 한다.

4. 시뮬레이션 결과 및 고찰

그림 4~9는 본 논문에서 모델 단면적으로 이용된 Ar, O₂, CF₄가스의 2항근사와 다항근사 볼츠만 방정식에 의해 계산된 전자수송계수(W와 ND_L)들이며, 각각 직선과 점선(+)으로 나타내고 있다.

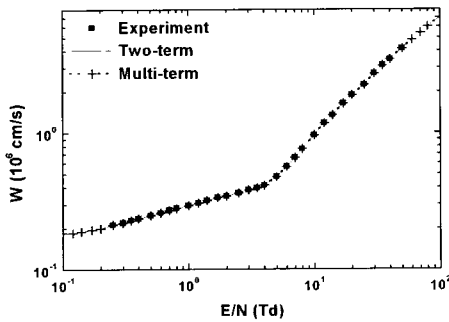


그림 4. Ar원자가스에서의 전자이동속도.

Fig. 4. The electron drift velocity in pure Ar.

1의 Ar 원자가스의 전자충돌단면적에서 탄성충돌인 운동량변환단면적만이 존재하는 10 eV이하 범위이다. 따라서 낮은 에너지 범위에서 목적으로 하는 단면적의 구성이 Ar 가스와 같이 탄성충돌단면적만으로 구성되어 있으면 그 단면적이 RTM과 같은 특성을 가지고 있어 전자수송계수에서 부구배(Negative Differential Conductivity, NDC)현상 [8]이 보이지더라도 시뮬레이션 방법에는 아무런 지장이 없음을 단적으로 보여주고 있다.

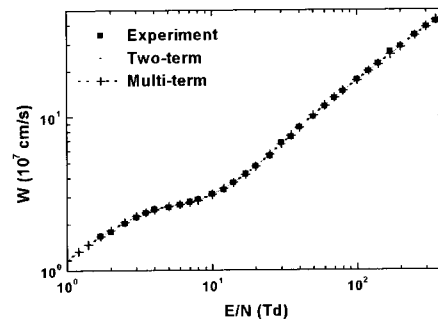


그림 6. O₂분자가스에서의 전자이동속도.

Fig. 6. The electron drift velocity in pure O₂.

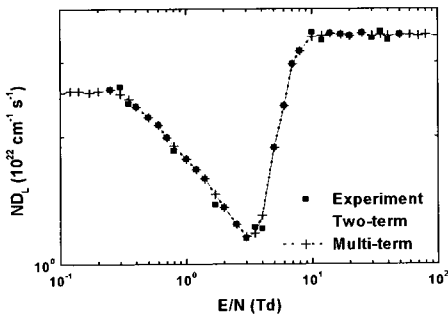


그림 5. Ar원자가스에서의 종방향확산계수(D_L)와 기체분자수밀도(N)와의 곱.

Fig. 5. ND_L in pure Ar.

그리고 이 값들은 Double Shutter Drift Tube를 이용한 측정값들[5-7]과 비교하였고, 그림에서 ■기호로 표시하고 있다.

그림 4와 5에서 보여지는 바와 같이, W와 ND_L 에서의 2항근사와 다항근사의 결과를 비교해보면 그 값들은 한치의 오차 없이 서로 일치하고 있다. 또한, 측정된 값과 비교가 되는 E/N 범위는 그림

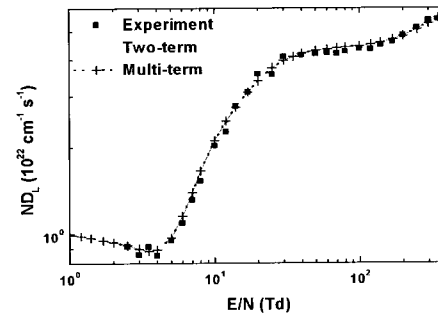


그림 7. O₂분자가스에서의 종방향확산계수(D_L)와 기체분자수밀도(N)와의 곱.

Fig. 7. ND_L in pure O₂.

그림 6과 7에서 보여지는바와 같이 O₂에서의 W와 ND_L 에서의 결과는 NDC현상이 보여지고 있으며, 이러한 현상이 보여지고 있는 E/N범위(3~20 Td)에 대한 전자에너지 범위는 그림 2의 커다란 공진 상태의 진동여기단면적이 시작되는 0.2 eV 부근이다. 두 시뮬레이션 방법을 이용한 계산결과는 이 부근에서 거시적인 오차(± 0.025)를 가지고

있으나, 낮은 에너지 범위에서 목적으로 하는 단면적의 구성이 O₂분자가스와 같이 탄성충돌단면적보다는 작으나 큰 공진 상태의 비탄성충돌단면적을 가지고 있어도 2항근사 볼츠만 방정식을 가지고 정확한 그 단면적 세트를 구성할 수 있음을 보여주고 있다.

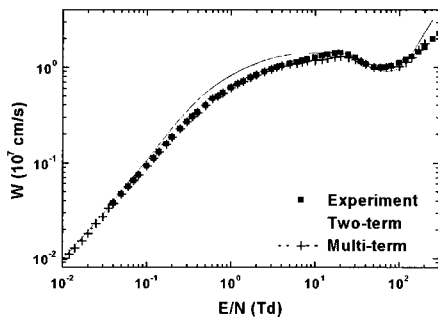


그림 8. CF₄분자가스에서의 전자이동속도.
Fig. 8. The electron drift velocity in pure CF₄.

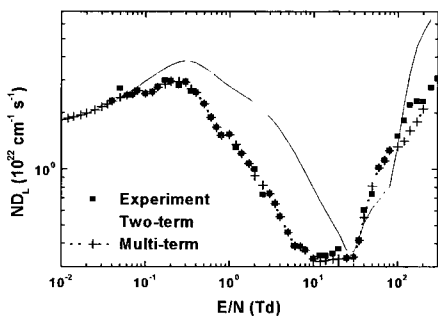


그림 9. CF₄분자가스에서의 종방향확산계수(D_L)와 기체분자수밀도(N)와의 곱.
Fig. 9. ND_L in pure CF₄.

그림 8과 9는 CF₄분자가스에서의 W와 ND_L의 측정결과와 두 시뮬레이션에 의한 계산결과를 보여주고 있다. 앞에서 보여주었던 결과와는 다르게 이 그림들에선 시뮬레이션 방법에 따른 오차를 확실히 보여주고 있다. 앞의 그림에서와 같이 두 수송계수에서 NDC현상을 보다 확실히 보여주고 있으며, 이러한 현상이 보여짐은 앞의 설명과 그림 3의 CF₄분자가스의 전자충돌단면적 세트의 구성을 비교해보면 쉽게 이해가 되리라 보여진다. NDC현

상이 보여지는 E/N범위(0.06~30 Td)에 대한 전자 에너지 범위는 0.08 eV 이상이며, 시뮬레이션의 결과에서 보듯이 C₃F₈, C₃H₈ 분자가스와 같이 RTM의 운동량변환단면적과 커다란 비탄성충돌단면적으로 구성되어 있으며, 전자의 속도분포함수에 비등방성이 강한 “C2_v 대칭계”가스[9]들은 2항근사 볼츠만 방정식에 의해서는 정확한 전자수송계수를 산출할 수 없음을 단적으로 보여주고 있다.

그리고 이 그림들에서 보여지는바와 같이 CF₄분자가스를 이용하여 반도체 에칭 등의 플라즈마 현상을 정량적으로 이해하기 위해서는 다항근사법에 의한 정확한 CF₄분자가스의 전자충돌단면적 세트의 결정이 요구되어지고 있다.

5. 결론

플라즈마 현상을 정량적으로 이해하려고 할 때, 또는 목적에 맞는 플라즈마를 만들기 위한 기체의 종류나 혼합비, 기체 압력 등의 평가를 하려고 할 때, 계산기에 의한 시뮬레이션은 유력한 수단이다. 이러한 시뮬레이션 기법 중 볼츠만 방정식 기법을 우리는 보편적으로 사용하고, 그 중에서 전자수송계수의 산출에 소요되는 시간이 비교적 짧은 2항근사 볼츠만 방정식을 가스의 구조적인 특성을 무시한 채 많이 사용하여 왔다. 여기에 본 논문에서는 구조적인 특성이 서로 다른 Ar, O₂ 그리고 CF₄ 가스들의 전자수송계수(W와 ND_L)의 비교를 통하여 2항근사와 다항근사 볼츠만 방정식의 적절한 적용을 보여주었다. Ar가스와 같이 낮은 에너지 범위에 탄성충돌단면적이 RTM 특성의 유·무와는 상관없이 단독으로 존재할 때는 2항근사의 기법을 이용하여 전자수송계수의 산출 및 단면적 세트의 결정이 가능하며, O₂분자가스와 같이 낮은 에너지 범위에 커다란 비탄성 충돌의 구조를 가진 단면적이 존재하더라도 그 단면적이 탄성충돌단면적보다 작은 값으로 존재할 때(비탄성충돌≪탄성충돌) 2항근사 기법에 의한 전자수송계수는 거시적인 오차는 가지고 있으나 무시할 정도로 작아 수송계수의 특성 해석이나 단면적 세트의 결정이 가능하다. 또한 CF₄분자가스와 같이 낮은 에너지 범위에서 탄성충돌에 비해 큰 비탄성 충돌 단면적의 구조(비탄성충돌≫탄성충돌)를 가진 “C2_v 대칭계”가스들은 전자의 속도분포함수에 비등방성이 강하기

때문에 정확한 수송계수의 산출과 그 분자가스가 가지고 있는 정확한 단면적 세트를 결정하기 위해서 다항근사 볼츠만 방정식 기법이 요구된다.

따라서 낮은 에너지 범위에서의 전자수송계수의 산출, 더 나아가 목적으로 하고 있는 가스의 전자 충돌단면적 세트를 구성하기 위해서는 그 단면적이 가지고 있는 구조적인 특성을 우선 파악하고, 적절한 시뮬레이션 기법을 적용하여야만 한다.

참고 문헌

- [1] W. R. L. Thomas, "The determination of the total excitation cross section in neon by comparison of theoretical and experimental values of Townsend's primary ionization coefficient", J. Phys., Vol. B2, p. 551, 1969.
- [2] H. Tagashira, Y. Sakai, and S. Sakamoto, "The development of electron avalanches in argon at high E/N values: II. Boltzmann equation analysis", J. Phys., Vol. D10, p. 1051, 1977.
- [3] K. Kumar, H. R. Skullerud, and R. E. Robson, "Kinetic theory of charged particle swarms in neutral gases", Aust. J. Phys., Vol. 33, p. 343, 1980.
- [4] R. E. Robson and K. F. Ness, "Velocity distribution function and transport coefficients of electron swarms in gases: spherical-harmonics decomposition of Boltzmann's equation", Phys. Rev., Vol. A33, p. 2068, 1986.
- [5] Y. Nakamura and M. Kurachi, "Electron transport parameters in argon and its momentum transfer cross section", J. Phys., Vol. D21, p. 718, 1988.
- [6] B. H. Jeon and Y. Nakamura, "Measurement of drift velocity and longitudinal diffusion coefficient of electrons in pure oxygen and in oxygen-argon mixtures", J. Phys., Vol. D 31, p. 2145, 1998.
- [7] B. H. Jeon and S. C. Ha, "The analysis of electron transport coefficients in CF₄ molecular gas by two-term approximation of the Boltzmann equation", 한국전기전자재료학회 2001춘계학술대회, p. 29, 2001
- [8] Z. L. Petrovic, R. W. Crompton, and G. N. Haddad, "Model calculations of negative differential conductivity in gases", Aust. J. Phys., Vol. 37, p. 23, 1984.
- [9] B. H. Jeon, S. C. Ha, and J. M. Yang, "Determination of the inelastic cross sections for C₃F₈ molecule by electron swarm study", Trans. on ZZM, Vol. 2, No. 1, p. 7, 2001.