

CFD를 이용한 내장형 안테나 유도 결합 플라즈마 시스템 모델링

주정훈*

군산대학교 공과대학 신소재공학과, 전북 573-701

(2009년 4월 27일 받음, 2009년 5월 21일 수정, 2009년 5월 21일 확정)

전산 유체 역학 코드를 사용하여 안테나 내장형 유도 결합 플라즈마 시스템의 가스 유동 특성, 전력 흡수, 전자 온도, 전자 밀도, 화학종의 분포에 대해서 살펴보았다. 복잡한 현실적 3차원 시스템에 대한 안정한 수치해의 도출을 위해서 최적화된 격자 생성 전략을 구사하였으며, 이를 이용하여 플라즈마 질화 시스템을 한 예로 전력 흡수, 가스 유동, 전자 온도, 전자 밀도, 화학종의 분포를 분석하였다. 금속 노출형 안테나의 경우 전력 도입부 쪽에 전력 흡수의 불균형이 모델에서 예측되었으며 유전체 피복 안테나의 한 예에서 전력 흡수 표면 깊이가 실제 보고된 값인 53 mm와 잘 일치하는 50 mm로 예측되었다. 또한 수소 연료 전지 분리판을 위한 고속 질화 공정용 시스템의 모델링에서도 산업용 대량 처리 시스템에 적절한 다중 분리판의 장입 간격을 가스 유동, 활발한 질화종인 질소 원자와 질소 분자 이온의 농도를 근거로 예측하였다.

주제어 : 유도 결합 플라즈마, 수치 해석, 내장형 안테나, 전산 유체 역학

I. 서 론

플라즈마를 이용한 공정 장비는 반도체 식각, 플라즈마 화학 기상 증착, 이온 주입, 대기압 플라즈마 표면 처리, 이온 플레이팅 등 많은 응용 분야에 활용되고 있다. 그 중 간단한 안테나를 이용하여 높은 밀도의 플라즈마를 손쉽게 얻을 수 있는 유도 결합 플라즈마는 1990년대 반도체 식각 장비에 응용되면서 많은 관심을 받게 되었다 [1]. 특히 10 mTorr의 저압에서 10^{11} #/cm³의 높은 전자 밀도를 쉽게 얻을 수 있는 점이 부각되어 산화막, 다결정 실리콘, 금속 등의 고속 식각에 많이 사용되었다. 그러나 선택적 산화막 식각의 경우 과도한 해리에 의한 선택도의 조절 곤란 등의 이유로 다시 이극형 용량성 결합 플라즈마 방식으로 돌아가기도 하였다. 현재 반도체는 300 mm 웨이퍼가 주종을 이루며 LCD는 약 2.2 m의 크기를 갖는 유리 기판이 8세대를 이루고 있으며 태양 전지의 경우 5세대로 시장 진입이 이루어지고 8세대와 10세대용 장비 개발이 진행되고 있다. 대당 수십억 원에서 수 백 억 원을 호가하는 이와 같은 장비의 개발에는 비용과 시간의 절약을 위해서 컴퓨터의 활용이 필수적이다. 플라즈마 장비는 구조상 플라즈마 발생

원, 가스 도입부, 반응챔버의 3개 부분으로 대별할 수 있다. 각각의 특성을 제대로 모사하기 위해서는 반드시 3차원 모델이 필요한 경우가 많다. 가스 도입부의 경우 플라즈마가 세라믹 가스 분배관 내부에 발생하는 것을 막기 위해서 1 mm 이내의 작은 가스 유로를 설계하게 되는데 챔버의 크기가 500 mm 이상의 직경을 갖고 있으므로 수치 해석적으로 0.1 mm 크기의 격자에서 시작을 해야 하는 부담이 생긴다. 실제 이렇게 만든 전체 시스템의 격자수는 천만 개를 넘으며 플라즈마를 고려한 유동과 화학 반응 계산 시간도 8 core 클러스터 시스템에서 2 주일 이상 걸린다. 무어의 법칙이나 황의 법칙을 따라서 컴퓨터의 연산 속도가 향상되고 있지만 병렬화의 효율이 획기적으로 개선되기 전에는 일일 디자인 개선이라는 반도체 업계들의 목표는 쉽게 장비 개발 업체에 전파되기 어려울 전망이다. 최근 GPGPU (general purpose graphic processing unit)를 사용하여 저렴한 비용으로 Tflops (tera floating operations per second)급의 계산 능력을 개인용 컴퓨터에서 쉽게 구현할 수 있게 되었다고 하지만 기본적인 알고리즘을 벡터화하고 그 효율을 최적화하기까지는 아직 많은 시간이 필요할 것으로 보인다.

* [전자우편] jhjoo@kunsan.ac.kr

현장에 도움을 줄 수 있는 3차원 모델은 기하적 구조와 수치적 수렴성간의 상관성 때문에 많은 경험을 필요로 한다. 또한 수치 모델의 한계도 있다. 예를 들어 2차원 모델에서는 가능하지만 3차원 모델의 경우 유도 결합 플라즈마와 용량성 결합 플라즈마를 여러 가지 주파수의 중첩 상태에서 풀지 못하고 있는 문제가 그것이다 [2]. 반응기의 크기가 고주파의 반응기 내에서의 실제 파장과 근접해지지는 경우 (8세대 급 LCD 반응기) 정상파 효과를 고려하여야 하고 이를 위해서는 맥스웰 방정식을 4개 모두 제대로 풀어야 한다 [3]. 이 또한 수치적으로 많은 계산 부담을 가져오는 일이다. 고주파 회로 설계에 사용되는 프로그램들의 경우 (CST, HFSS) 전자기장에 대해서는 보다 엄밀한 해를 구할 수 있으나 공간적으로 불균일한 전도도를 갖는 플라즈마를 적절히 다룰 수 없는 문제가 있다. 또한 반응성 가스에 의한 효과도 다룰 수 없다. 따라서 전산 유체 역학 코드나 입자 모델링(particle-in-cell)을 이용하여 그 결과를 예측하는 방법이 현재로서는 최선이다.

본 연구에서는 2차원 및 3차원 모델을 이용하여 내부 삽입형 안테나를 갖는 유도 결합 플라즈마 시스템의 특징을 살펴보고자 한다. 안테나 외장형에 비해서 장비 구성의 용이함을 가장 큰 특징으로 하면서 전도성 금속류 박막의 코팅에도 무리없이 적용할 수 있는 등의 부가적인 장점을 가지고 있어서 여러 가지 박막 코팅 및 표면 처리 분야에 응용되고 있다 [4]-[25].

II. 실험방법

1. 기본 유체 방정식과 유도 결합 플라즈마 모델

식 (1)-(4)가 기본적인 입자수 보존과 에너지 보존에 대한 식과 전자의 확산 플럭스 및 전기장에 대한 식이다. 이들 식의 내용에 대해서는 배상현 등의 논문에 [26] 잘 정리되어 있으므로 여기서는 유도 결합 플라즈마의 경우 적용할 수 있는 근사법에 대해서만 설명한다. 플라즈마 모델링에서 많은 연산 시간을 소요하는 부분의 하나가 하전 입자의 공간적 분포가 확산이나 전기장에 의한 드리프트에 의하여 변경 되었을 때 다시 포아송 방정식을 풀어서 전계 분포를 구하는 일이다. 특히 3차원 모델의 경우 이 스텝이 전체의 연산 속도를 좌우하게 된다. 그러나 플라즈마 영역에

서는 준중성 조건이 만족되는 점을 고려하여 1차 근사로 포아송 방정식을 풀지 않는다.

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{T}_e = S \quad (1)$$

$$\vec{T}_e = -\mu_e n_e \vec{E} - D_e \nabla n_e \quad (2)$$

$$\begin{aligned} & \frac{3}{2} \frac{\partial}{\partial t} (n_e T_e) + \nabla \cdot \left(\frac{5}{2} T_e \vec{T}_e - \frac{5}{2} n_e D_e \nabla T_e \right) \\ & = \vec{j}_e \cdot \vec{E} - n_e \sum_i^n N_i K_i \epsilon_i \end{aligned} \quad (3)$$

$$\vec{E}_{ind} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad (4)$$

$$n_e = \sum q_i \cdot n_i \quad (5)$$

$$\nabla \cdot \vec{J} = 0 \quad (6)$$

$$\vec{E} = -\frac{\nabla p_e}{q_e \rho_e} \quad (7)$$

n_e : electron density (#/cm³)

T_e : electron temperature (eV)

S : electron source term (#/cm³ · sec)

\vec{T}_e : electron flux (#/cm² · sec)

μ_e : electron mobility (cm²/V · sec)

D_e : electron diffusivity (cm²/sec)

\vec{E}_{ind} : rf induced electric field vector (V/m)

\vec{j}_e : electron current density (mA/cm²)

N_i : mole fraction of i-th reaction

K_i : reaction constant for i-th reaction,

ϵ_i : electron energy loss due to i-th reaction

\vec{A} : magnetic vector potential

q_i : charge of i-th ion

\vec{J} : total conduction current density (electron, ion)

P_e : electron pressure

ρ_e : electron mass density

즉, 식 (5)-(7)을 이용하고 대개의 경우 순수 전도 전류가 영이라는 점을 ($\vec{J}=0$) 이용하여 하전 입자 농도 분포 차이에 의한 전기장을 식(7)처럼 쉽게 구할 수 있다 [27]. 유도 전기장과 농도 분포 차이에 의한 전기장의 합이 총 전기장이 된다. 쉬스의 처리는 기본적으로 Bohm 쉬스 모델을 이용하며 추가적으로 직류 및 교류 전압을 인가할 수 있다.

이때는 Mille-Riley model을 사용한다 [28]. 가스 압력의 경우 non-local heating 모델이 고려되어 있지 않고 유체 방정식을 이용하므로 10 mTorr이상의 압력에 대해서만 유효하다. 다행히 내부 삽입형 안테나를 이용한 스퍼터링, 화학기상증착, 질화 공정의 경우 대개 10 mTorr에서 1 Torr 사이의 압력을 이용하고 있으므로 이 계산 모델의 적용에는 큰 무리가 없다고 판단된다. 확산 계수와 이동도의 경우 1차 근사에서는 이온의 확산 계수를 동등한 중성의 값과 같다고 가정하고 아인슈타인 관계식을 이용하여 이동도를 계산하였으며 이는 Langevin식과 여러 종의 이온이 있을 때 물분율을 가중치로 사용하는 Blanc법칙으로 정확도를 향상시킬 수 있으며 궁극적으로는 Boltzmann 방정식을 이용하여 확산 계수, 이동도, 화학 반응 속도를 구하여야 하는데 현실적으로 두 가지 어려움이 있다. 하나는 모든 전자 충돌 반응의 충돌 단면적 데이터를 구해야 한다는 것이고 두 번째는 계산 시간이 기하급수적으로 증가하여 2차원, 3차원의 계산에는 현재의 개인용 컴퓨터 하드웨어 연산 능력으로는 적합하지 않다는 것이다. 0차원 모델을 이용하여 일정 범위의 전자 에너지에 대해서 이들 계수를 미리 계산하여 표로 만들어 놓고 이를 2차원, 3차원 모델에 적용하는 방법도 CFD-ACE+에 모듈로 소개되어 있으나 계산 결과가 일반 모델의 값과 큰 차이를 보이지 않고 있으며 병렬 계산 모듈과 호환이 되지 않고 있다. 본 연구의 목적은 계산 모델의 엄밀성이나 정확도를 높이는 것 보다는 기하적 복잡성 때문에 현장에서 적용이 쉽지 않은 수치 모델의 유용성을 증가시킬 수 있는 부분에 대한 실증적 결과에 대해서 논의하도록 한다. Kinetic 모델의 적용에 대한 연구는 계속 진행 중이다.

2. 내부 삽입형 안테나의 특징

금속 안테나를 플라즈마 내부에 삽입하면 플라즈마 전위와의 차이에 의해서 이온 충돌이 발생하고 대개의 고전도도 금속의 스퍼터링 문턱 에너지가 수 십 eV에 불과한 점을 감안하면 금속 원자에 의한 오염을 피할 수 없다. 따라서 스퍼터링 수율이 낮은 유전체를 적당한 두께로 금속 안테나에 덧 씌워서 오염을 방지하여야 한다. Setsuhara 등은 U자형 안테나를 사용하면서 석영관의 두께를 12 mm 이상으로 두껍게 하여 안테나 유닛 주변의 전력 밀도를 낮추어서 스퍼터링에 의한 오염을 줄이려는 시도를 하고 있다 [29]. 이 때 유전체의 표면 전위를 구하려면 위의 간략화

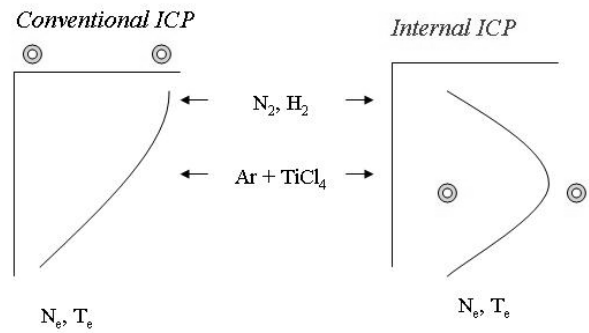


Figure 1. Internal antenna type ICP has flexibility of gas inlet position to facilitate controlled dissociation of reactive precursors.

모델을 사용하지 말고 포아송 방정식을 제대로 푸는 것이 필요하며 기본적으로 시변 문제가 된다. 현재 CFD-ACE는 모델의 한계로 3차원의 경우 유도 결합 플라즈마원과 용량성 결합 플라즈마원을 동시에 처리하지 못하므로 2차원에서 그 영향을 해석할 수밖에 없다.

내부 삽입형 안테나의 장점 중 하나로는 두꺼운 유전체창이 필요하지 않고 기존의 금속제 챔버를 그대로 사용한 채 안테나만 삽입하면 된다는 장비 설계의 용이함과 플라즈마의 균일도, 화학적 반응성을 크게 좌우하는 가스 도입 위치와 플라즈마의 고밀도 영역의 상대적 관계를 자유롭게 조절할 수 있다는 것이다. 즉, Fig. 1처럼 높은 전자 온도 및 전자 밀도의 영역을 챔버 내에서 비교적 자유롭게 설정할 수 있고 분리 주입에 따른 효과도 볼 수 있다 [30].

3. 병렬 계산의 효율성

유체 유동, 화학 반응, 전기장, 자기장, 전자 온도 등의 방정식을 모두 풀기 위해서는 적절한 격자의 형성이 가장 중요하다. 그리고 셀의 수가 백 만 개를 넘는 경우에는 단일 PC에서는 일주일 이상 소요되므로 저렴한 PC 클러스터를 이용하는 것을 고려해 볼 수 있다. 본 연구에서는 인텔사의 E8750 CPU 8코어와 기가비트 이터넷을 이용한 시스템을 사용하여 최대 8개의 영역으로 분할하여 계산을 진행하였다. Metis 방법이라고 불리는 다중 그래프 분할 방법으로 비슷한 개수의 셀을 갖도록 분할한 다음 경계면을 따라서 고스트 셀을 추가하여 경계면에서의 변수 값을 서로 전달한다. 병렬라이브러리는 MPICH가 사용되고 있다. 플라즈마 계산의 경우 일회 반복 계산에 많게는 1시간 이상

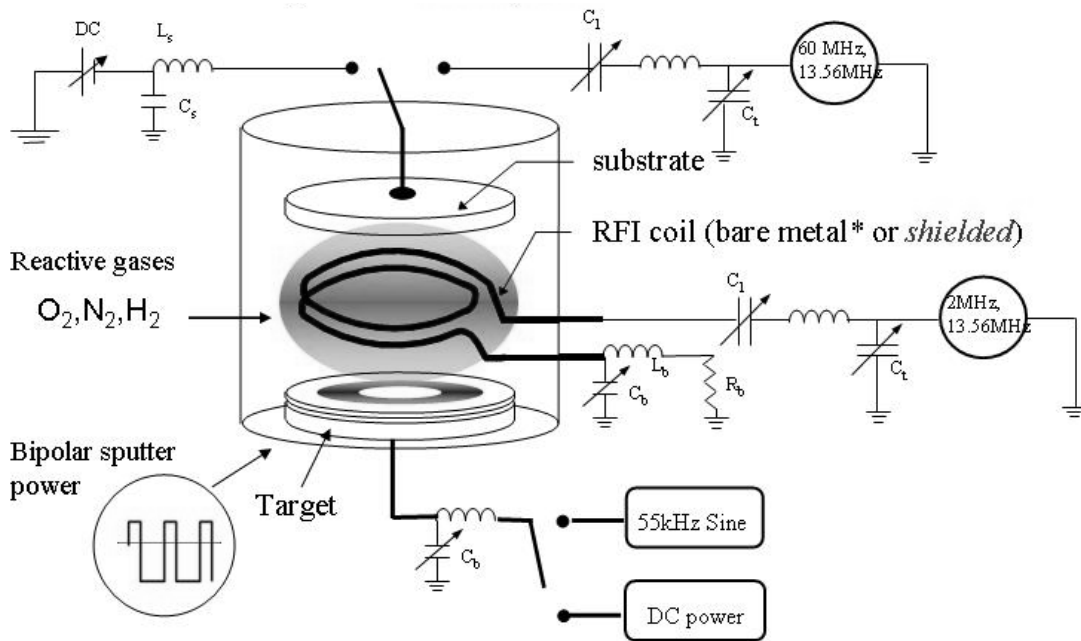


Figure 2. An example configuration of internal antenna type inductively coupled plasma system.

소요되므로 이런 경우에는 네트워크의 속도가 울속 단계가 되지 않는다. 셀의 개수가 작고 분할 영역의 개수가 많은 경우에는 높은 속도의 네트워크가 필수적이다. 내장형 안테나 타입 유도 결합 모델의 경우에는 단일 CPU내에서의 연산 속도가 가장 중요하였으며 CPU에 내장된 캐시 메모리의 크기가 연산 속도에 많은 영향을 미치고 있었다. 또한 쿼드코어 CPU를 가진 단일 PC에서는 3개의 영역까지 나누어 계산해도 병렬 효율이 80%까지 유지되었다.

4. 부품별 계산 후 전체 시스템 모델로 통합의 용이성

천만 개 이상의 셀을 갖는 전체 시스템 모델은 유동 특성 확인에도 2-3일씩 걸리므로 작은 부품 하나의 변경 효과를 검증하기 위해서 투자되는 시간이 과도하다. 따라서 각각의 개별 부품들 (안테나 모듈, 가스 분배판 모듈, gas baffle) 등은 단순화된 테스트 구조에서 일단 유동, 전자기장 등의 기본 특성 검증을 거치고 최종 시스템 모델에 조립하는 실제와 유사한 단계를 고려할 수 있다. CFD-ACE는 3차원 캐드 시스템 파일을 입력 할 수 있는 기본 기능을 가지고 있는데 약간의 제약이 따르며 비구조화 격자의 경우 수치해의 수렴성을 좌우하는 셀의 정규성 여부(사면체 셀의 내부 각이 너무 작지 않게 설정되어 있어야 함) 등은 수

작업으로 확인을 하면서 진행할 필요가 있다. 대개 작은 곡률을 갖는 부분이나 3개 이상의 면이 만나는 부분 등은 수작업으로 계산 영역을 구분해주어야 한다.

III. 계산 결과 및 고찰

1. 내장형 유도 결합 안테나 시스템의 전자 온도와 밀도 분포

Fig. 2에 마그네트론 스퍼터링 시스템에 내장형 유도 결합 안테나를 적용한 예를 나타내었다. 여러 가지 전력원을 사용할 수 있는 가변성이 큰 시스템 구조이며 기본적으로는 2 회전 안테나를 내장하고 있다. 여기서 측정한 전자 온도와 밀도의 반경 방향 분포를 보면 Fig. 3에서와 같이 가운데가 전자 밀도가 $2.2 \times 10^{11} \text{ #/cm}^3$ 로 높고 전자 온도는 안테나의 바로 밑이 3.1 eV로 중앙부의 2.8 eV보다 조금 더 높은 분포를 가지고 있다. 플라즈마 전위의 경우 안테나의 표면을 얇은 유전체 튜브로 피복을 한 시스템이어서 16-26 V를 나타내고 있다. 순수 금속 안테나의 경우 접지 쪽을 콘덴서로 부유 시키지 않은 경우 100 V내외의 높은 플라즈마 전위를 보이고 있는 것으로 측정 되었으며 안테

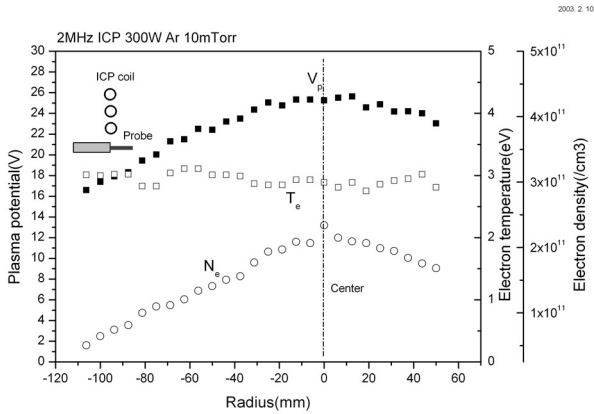


Figure 3. Measured profile of electron temperature and density in an internal ICP magnetron sputtering system.

나 물질의 스퍼터링이 심하게 나타나서 동일한 물질의 증착의 경우가 아니면 공정에 적용하기 어려운 것으로 판단된다. 이 때 측정된 Langmuir probe는 안테나 밑 약 10 mm 정도를 지나가도록 되어 있었다. 이 모델을 2차원으로 하여 계산 한 결과를 Fig. 4에 표시 하였는데 가운데에서의 값은 잘 일치하나 챔버 벽에 가까워질수록 계산 결과와 측정값이 차이를 가져온다. 이것은 계산 모델에서 경계 조건으로 사용한 값과 실제 값의 차이에서 오는 오차로 판단되는데 문헌에 보고되는 모델 결과에서도 정확한 경계 조건은 제시하지 않고 있는 경우가 많다. 표면 반응 계수, 예를 들면 알곤 이온의 재결합 확률에 대해서도 일반적인 금속의 경우 1.0을 적용하여 계산하는 것이 보통이지만 재질에 따라서 훨씬 낮은 값인 0.1을 적용하는 경우도 보고되어 있는데 [30], 낮은 재결합 계수를 적용하면 벽면 근처에서의

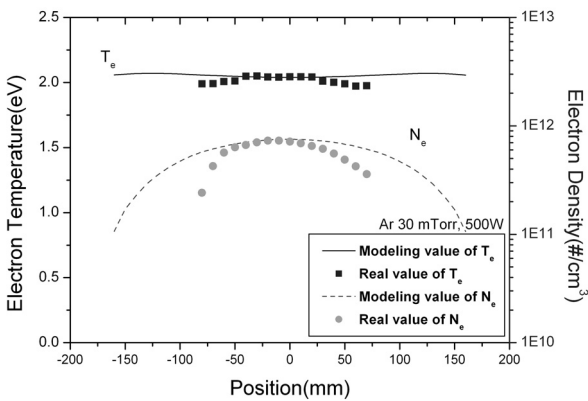


Figure 4. Modeling results of electron temperature and density profile along radial direction.

전자 밀도가 높게 계산된다. 즉, 실제로 구하기 어려운 반응 계수를 마치 fitting parameter처럼 사용하여 실제로 측정된 공간 분포와 유사한 계산 결과를 만들어 낼 수도 있다는 것이다.

2. 수치 모델의 구성

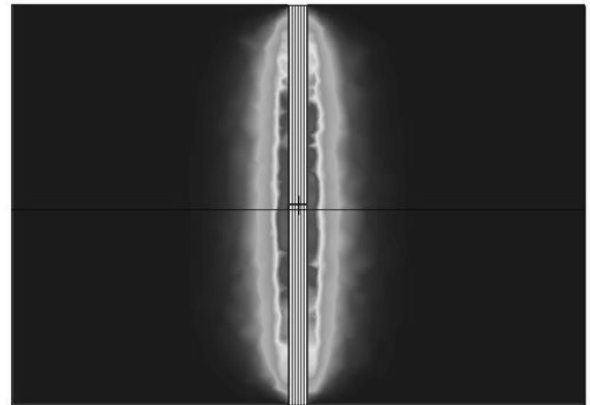


Figure 5. Power absorption pattern of a single rod internal ICP system with a tetrahedral mesh.

내장형 안테나의 바로 주변에는 높은 유도 자기장이 형성된다. 이에 따른 전력 흡수 밀도도 역시 증가하는데 이를 제대로 계산해 내려면 치밀한 격자 생성 전략이 필요하다. 특히 사면체 비구조 격자를 이용하면 1-2 mm에 불과한 얇은 침투 깊이에서 안정적인 전력 흡수 분포를 정밀하게 계산하기 어렵다(Fig. 5). 이 skin depth에 해당하는 부분을 물리적 현상의 대칭성을 갖는 구조 격자로 대체하면 Fig. 6과 같은 정밀한 전력 흡수 패턴을 갖게 되고 이에 따른 중들의 생성, 확산 분포도 안정적인 해를 얻을 수 있다. 하나의 원형 내장 안테나를 갖는 시스템에서 전력 흡수를 Fig. 7에 나타내었다. 25 mm 가 전력 흡수 패턴의 반가폭이며 50 mm 정도까지는 전력 흡수에 의한 전자 가열이 일어나는 표피라고 볼 수 있다. 압력이 낮은 조건일 때의 이론적 침투 깊이는 $\delta = c/\omega_p$ 가 되므로 [31] 전자 밀도가 10^{10} #/cm^3 이라고 하면 53 mm가 되어 모델 결과와 잘 맞는다. 외장형 안테나의 경우 두꺼운 유전체 창을 지나서 플라즈마와 결합하게 되므로 전력 전달의 효율 면에서는 내장형 안테나 방식이 유리하다.

3. 금속 안테나와 유전체 피복 안테나의 비교

내부 삽입형 안테나를 금속으로 제작할 경우를 모델링해

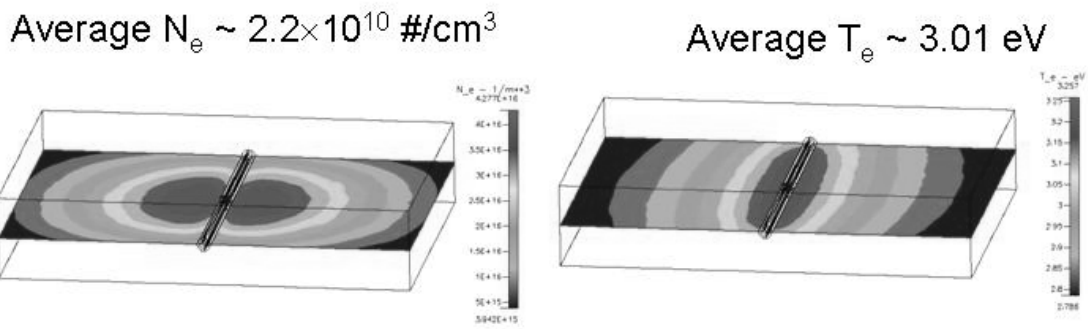


Figure 6. Modeled electron temperature and density profile with structured meshes around the internal single rod ICP antenna.

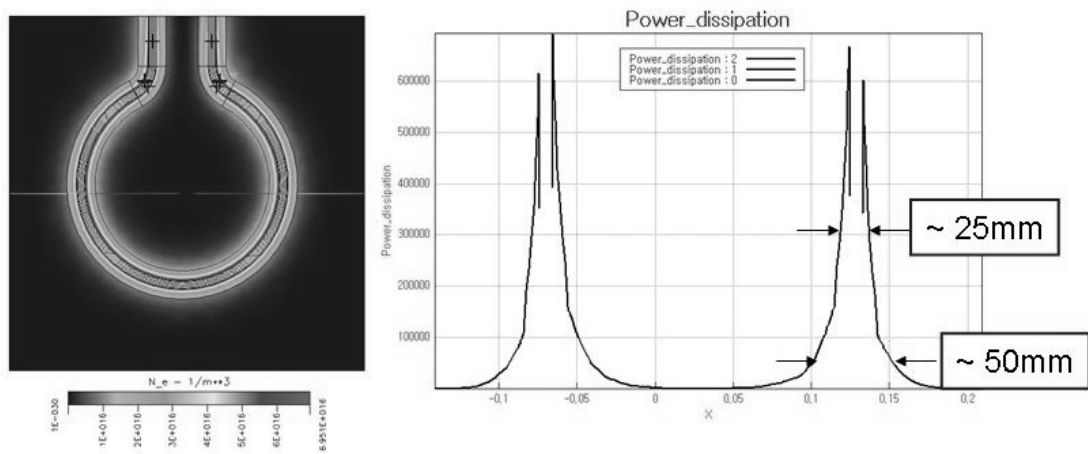


Figure 7. Power absorption pattern around one turn loop antenna showing full width at half maximum of 25 mm.

보면 Fig. 8과 같이 고주파 전압이 인가되는 부분에 전력 흡수가 집중되는 것을 볼 수 있다. 반면 절연체로 피복을 한 경우에는 일반적인 유도 결합 플라즈마의 전력 흡수 분포 양상을 보인다. 금속 안테나의 특징은 고전압에 의한 용량성 결합으로 플라즈마 전위의 진폭이 커서 접지된 기관의 경우 높은 이온 에너지를 갖는 입자 충돌을 경험하게 되고 치밀한 박막 구조를 원하는 경우에는 기관의 바이어스 없이도 목적을 달성할 수 있다. 마치 내장형 금속 유도 결합 안테나가 양극의 역할을 일부 한다고 해석할 수 있다. 고주파 전력의 챔버 공급단 쪽에서 측정된 피크 전압은 수백 볼트 수준이다. 그러나 일단 플라즈마 밀도가 일정 수준 이상으로 증가하면 인입단 쪽의 용량성 결합은 감소하고 고밀도 플라즈마가 형성된다. Fig. 9에는 나선형으로 제작한 금속 안테나에 의한 정상적인 H-mode의 방전 형상을 보여 주고 있다. 오히려 안테나 출력단에 커패시터를 설치하여 임피던스를 낮추어 줌으로써 안테나 전압을 줄이고

1 turn internal ICP (bare metal antenna) 13 MHz 50V Ar 10 mTorr

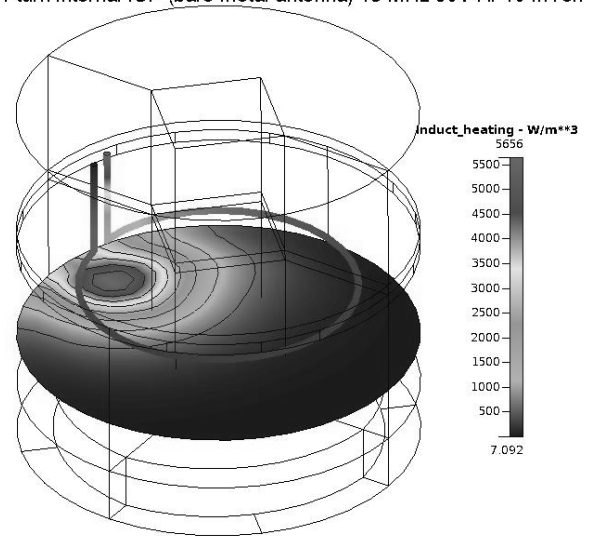


Figure 8. Power absorption pattern of a metal antenna ICP system.

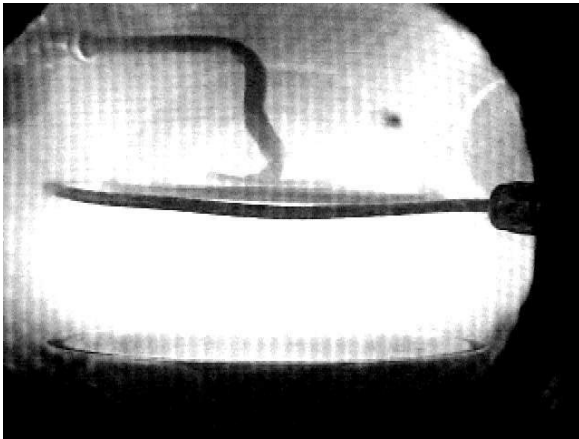


Figure 9. A shape of an inductively coupled plasma in H-mode generated by a copper coil antenna.

이에 따른 금속 스퍼터링을 낮추는 방법이 유전체를 피복하는 것보다 더 효과적일 수 있다.

Fig. 10과 같이 임피던스 분석기를 고주파 전력 발생기와 수동 고정 매칭 박스 사이에 설치하고 플라즈마의 발생에 따른 전체 임피던스의 변화를 살펴보면 투입 전력이 증가함에 따라서 기판 전류가 선형적으로 증가하고 고주파 부하가 순수 저항 성분으로 변화하는 것을 볼 수 있다. 이때 스퍼터링 음극의 전압이 340 V에서 250 V로 감소하는 것을 관찰할 수 있었다. 즉 유도 결합 플라즈마에 의한 임피던스 감소로 스퍼터링 타겟의 방전 전압이 감소한 것이다. 이는 플라스틱 필름 등 하전 입자 충돌에 민감한 소재에 플라즈마를 적용하는데 중요한 요인이 되며 가능한 플

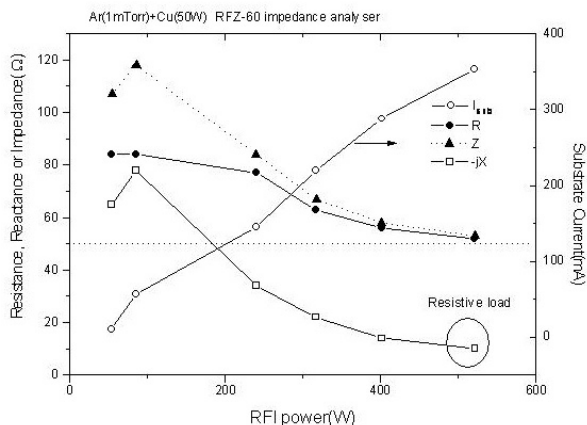


Figure 10. RF impedance characteristics and substrate current as a function of internal antenna ICP power.

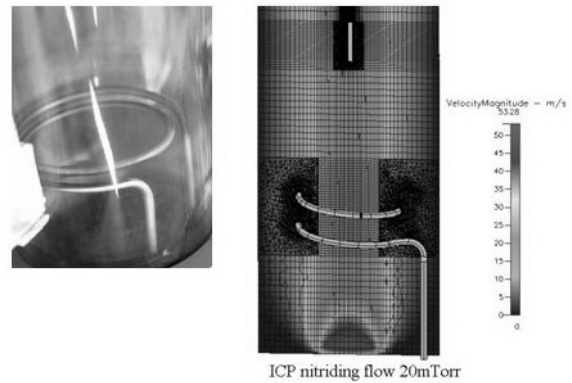


Figure 11. A chamber for ICP nitriding and modeled velocity magnitude distribution result with meshing structure.

라즈마 전위의 진폭을 줄이는 것이 유리한 방향이 된다.

4. 수소 연료 전지용 분리판의 질화를 위한 유도 결합 플라즈마 시스템의 해석

Fig. 11은 금속 분리판의 내부식성을 향상시키기 위한 방안으로 저렴한 스테인레스강을 표면 처리하여 사용하는 방법의 하나로 질화를 이용하는 시스템이다. 크롬 산화막이 존재하는 스테인레스강의 표면을 질화하려면 일정한 깊이 이상의 이온 충돌이 있어서 표면을 식각한 다음 질소와 수소로 이루어진 혼합 가스의 방전을 이용한다. 이 때 반응기 내에 잔류하는 산소는 다시 산화물 피막을 형성하므로 수소 가스를 이용하여 표면 산화를 억제한다. 이 모델링에는 질소와 수소의 전자 충돌 반응에 대한 상수가 필요하다. 가장 좋은 방법은 각 반응의 전자 충돌 단면적을 넓은 전자 에너지 영역에 대해서 구한 후 이를 근거로 볼츠만 방정식을 풀어서 전자 온도에 따른 확산 계수, 이동도, 화학 반응 속도를 구하는 것이다. 이를 위한 단면적 데이터베이스는 국가핵융합연구소와 과학기술정보연구원에서 추진하고 있는 정보DB를 참조하는데 아직 완전한 반응 상수를 모두 구할 수 있는 상태는 아니며 특히 표면 반응에 대한 데이터는 구축되어 있지 않고 있다. 따라서 플라즈마의 일반적인 거동을 살펴볼 목적으로 알곤에 대한 모델링을 먼저 하였다. Fig. 11에는 실제 사진과 그리드 생성 구조를 나타내었다. 약 백만 개 정도의 사면체 및 육면체 셀이 복합 사용되었으며 Fig. 12에 보인 것과 같은 전자 온도와 밀도 분포를 갖는다. 온도는 2.2에서 3 eV, 밀도는 10^{11} #/cm³ 정도를 나타내었다. 이 시스템의 특징은 석영관으로 만들어서 가열

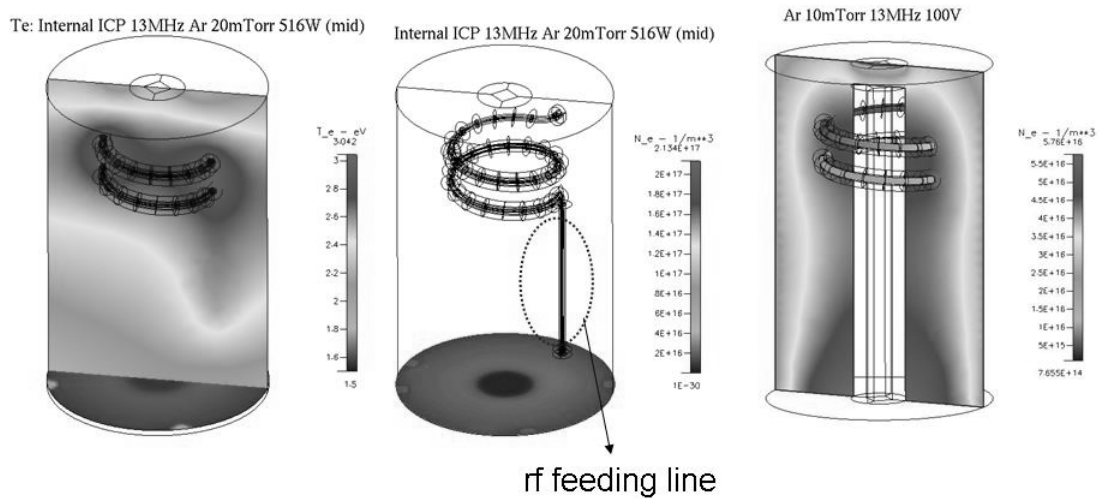


Figure 12. Electron temperature and density profile of ICP nitriding system (diameter=180 mm, height=300 mm).

로의 내부에 장착한 전형적인 온벽 시스템 내부에 금속 유도 결합 안테나를 장착한 점인데 긴 인입선의 효과로 시편이 없는 부분에 많은 전력 흡수가 일어나고 있으며 따라서 가스 도입구를 겸하고 있는 고주파 도입단 부분의 전자 밀도가 오히려 높아졌다는 점이다. 추후 대형 시스템으로 양산화를 고려한다면 전력 효율의 측면에서 재고해야 할 것으로 생각된다. 여기에 여러 장의 얇은 (0.3 mm) 스테인레스 강판을 장착 했을 경우를 2차원으로 계산하였는데 Fig. 13에 나타내었다. 판사이의 간격은 1 mm로 설정한 경우인데 유동 해석 결과를 살펴보면 유속이 너무 낮아서 질화 속도를 높일 수 있는 질소 원자와 질소 분자 이온의 공급이 모자랄 것으로 판단된다. 즉, 최적의 생산성을 위해서는 질화 소요 시간과 최대 적재량 사이에 존재하는 상보 관계를

찾는다. 이를 확인하기 위해서는 각 시편의 표면에서 질소 원자의 플럭스를 비교하면 된다. 시편 사이의 간격을 3 mm로 증가시킨 경우의 예를 Fig. 14에서 보면 시편 간극에서의 유동 속도는 1 mm 경우보다 증가하였으나 주변 보다는 훨씬 낮아서 실제 플라즈마에서 발생하는 해리종들이 시편 사이보다는 주변으로 손실되는 양이 더 많은 것으로 나타나고 있다. 질화에 가장 중요한 질소 원자의 밀도는 10^{12} #/cm³이며 질소 분자 이온의 밀도는 이 보다 1/100 정도로 낮다. 또한 질소 분자 이온은 내장 안테나와 접하는 부분에만 밀도가 높고 시편 사이로 들어가면서 급격히 밀도가 감소한다. 만일 질화에 질소 원자보다 이온이 더 큰 영향을 주고 있다면 실제 시편의 질화 균일도는 매우 나쁠 것으로 예상된다. 질화의 메커니즘을 표면 흡착과 확산으

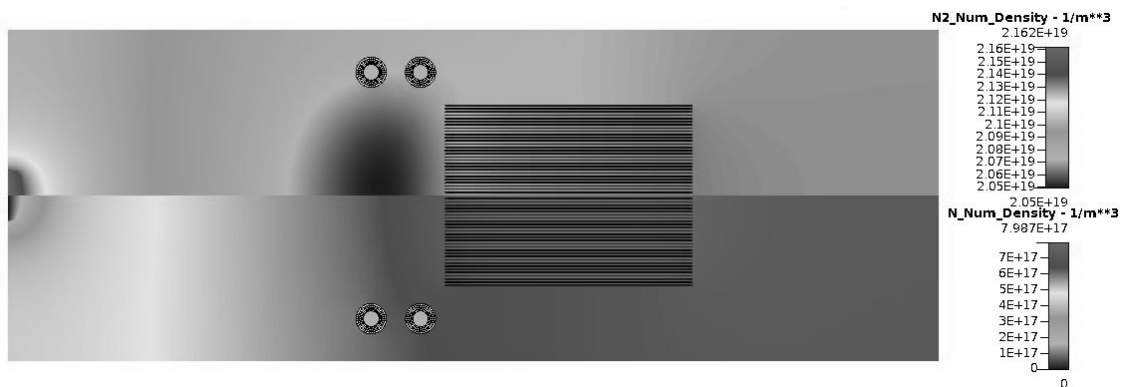


Figure 13. Nitrogen molecule and atom density profile in a 2-turn dielectric covered ICP system loaded with thin SUS sheets (N_2 : $H_2=5:5$, 20 mTorr, 13 MHz, 50A, diameter=133.6 mm, length=377 mm).

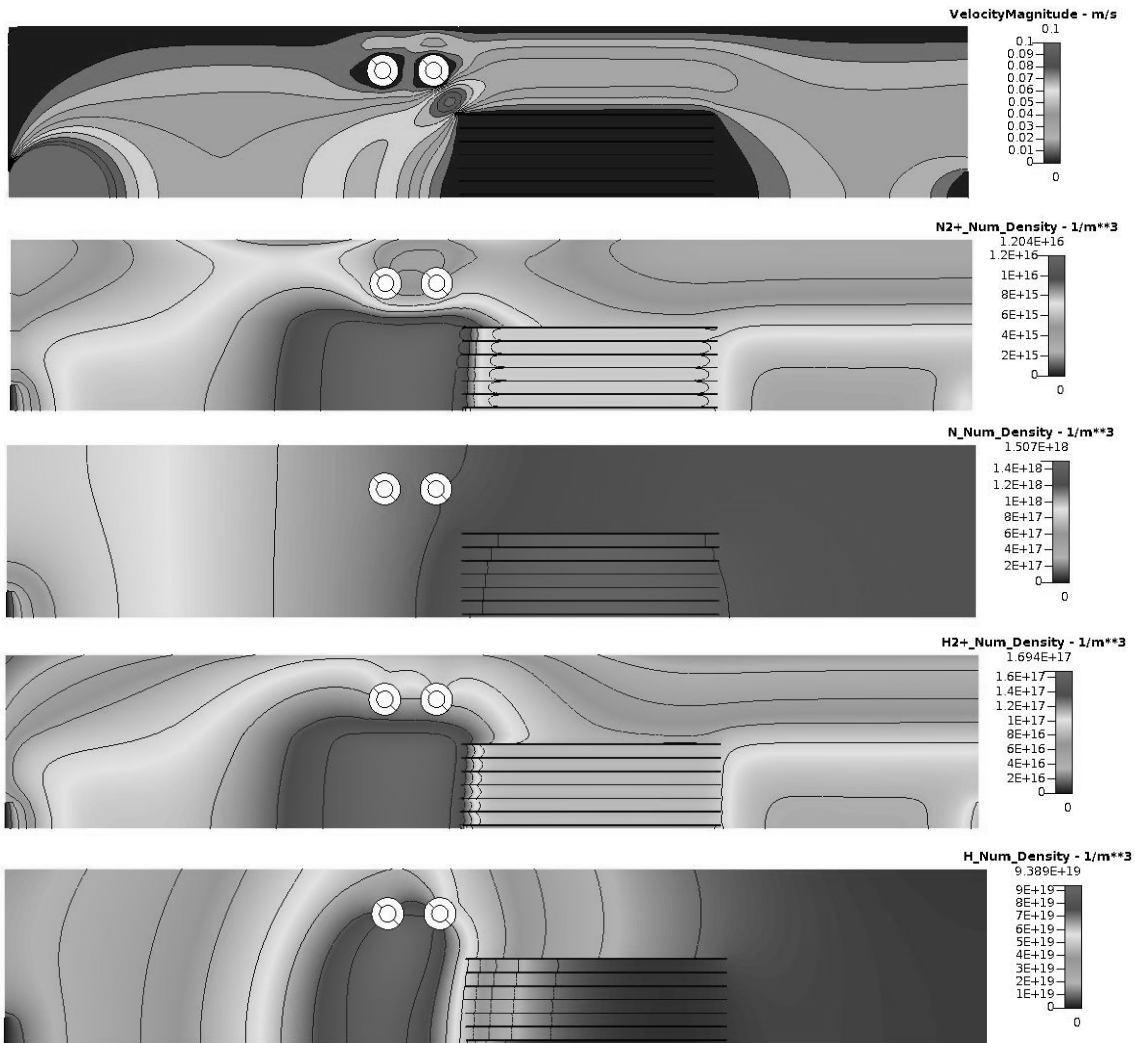


Figure 14. Velocity magnitude and other species number density profiles in H₂+ N₂ internal ICP discharge system for nitriding of stainless steel sheets for hydrogen fuel cell plates(velocity magnitude, N₂⁺, N, H₂⁺, H number density, diameter=133.6 mm, length=377 mm).

로 나누어 해석한다면 일정한 포화 농도를 갖는 가스 원자나 분자를 지속적으로 공급하고 이온 충돌로 결정 결함을 만들어서 표면 반응을 활성화 시킬 수 있는 일정 값 이상의 에너지를 갖는 이온을 시편 전체에 균일하게 공급할 수 있는 방법의 고안이 중요하다.

플라즈마를 이용한 질화 과정에서 발생하는 질소 원자와 분자 이온의 비율에 대해서 Bai [32]-[33]등은 비활성 가스인 He, Ar, Xe의 혼합비 및 전자 온도와의 함수 관계를 보고 하였다. 식 8에 나타낸 것과 같이 질소 원자 이온의 비는 전자 온도의 지수에 비례하여 증가한다.

$$[N^+]/[N_2^+] = C \cdot e^{-8.7/T_e} \quad (8)$$

이들은 이와 같은 방법으로 비활성 가스 혼합에 의해서 질소 원자 이온과 분자 이온의 비율을 0.002에서 1.4까지 조절할 수 있었다고 한다. 그러나 실제 질소 플라즈마에서 이온이 차지하는 비율 자체가 낮아서 전체적인 질화 공정을 좌우한다고 보기에는 무리가 있지만 이온이 큰 비중을 갖는 이온 주입 공정에는 중요한 결과라고 할 수 있다. Fig. 14에서 보는 것처럼 질소 원자가 질소 분자 이온보다 약 100배 정도 많으므로 질화 공정의 속도론에 대한 고찰에서는 이온과 함께 반응성이 높은 원자상 질소에 대해서도 관심을 가져야 한다고 생각한다. 1 Torr의 높은 압력과 25 kHz정도의 낮은 주파수의 펄스 직류 플라즈마에 의한 스테인레스강의 질화막 성장 속도에 관한 논의들에서

[34]-[35] 원자상 질소를 OES로 검지하지 못한 것은 높은 압력에서 펄스 직류만으로는 원자상 질소의 생성에 필요한 높은 전자 온도를 얻기 힘들기 때문으로 판단된다. 이점이 유도 결합 플라즈마의 큰 장점으로 판단된다.

IV. 결 론

전산 유체 역학 코드를 사용하여 안테나 내장형 유도 결합 플라즈마 시스템의 가스 유동 특성, 전력 흡수, 전자 온도, 전자 밀도, 화학종의 분포에 대해서 살펴보았다. 안테나 내장형 시스템은 외장형에 비해 용이한 스케일업과 가스의 분리 도입 가능성, 높은 전력 전달 효율 등으로 많은 산업적 응용 가능성을 가지고 있다. 금속 노출형 안테나의 경우 전력 도입부 쪽에 전력 흡수의 불균형이 모델에서 예측되었으며 유전체 피복 안테나의 한 예에서 전력 흡수 표피 깊이가 실제 보고된 값인 53 mm와 잘 일치하는 50 mm로 예측되었다. 또한 수소 연료 전지 분리판을 위한 고속 질화 공정용 시스템의 모델링에서도 산업용 대량 처리 시스템에 적절한 다중 분리판의 장입 간격을 가스 유동, 활발한 질화종인 질소 원자와 질소 분자 이온의 농도를 근거로 예측하였다.

감사의 글

본 연구는 지식경제부 소재원천기술개발사업의 연구비 지원으로 수행되었습니다.

참고문헌

- [1] S. Rossnagel and J. Hopwood, *Appl. Phys. Lett.*, **63**, 3285 (1993).
- [2] 손채화, *한국전기학회논문지* **55C**, 601 (2006).
- [3] Yang Yang and Mark J. Kushner, *J. Vac. Sci. Technol A*, **25**, 1420 (2008).
- [4] A. Mayo, S. Hamaguchi, J. Joo, and S. Rossnagel, *J. Vac. Sci. Technol B*, **15**, 1788 (1997).
- [5] Junghoon Joo, *J. Vac. Sci. Technol A*, **17**, 2368 (1999).
- [6] Junghoon Joo, *J. Vac. Sci. Technol A*, **18**, 23 (2000).
- [7] Ju-Wan Lim, Heung-Sik Park, Tae-Hyeong Park, Jung-Joong Lee, and Junghoon Joo, *J. Vac. Sci. Technol A*, **18**, 524 (2000).
- [8] Junghoon Joo, *J. Vac. Sci. Technol A*, **18**, 2006 (2000).
- [9] H. S. Park, D. H. Jung, H. D. Na, J. H. Joo, and J. J. Lee, *Surf. Coat. Technol.*, **142-144**, 999 (2001).
- [10] S. J. Jung, K. H. Lee, J. J. Lee, and J. H. Joo, *Surf. Coat. Technol.*, **169-170**, 363 (2003).
- [11] D. H. Jung, H. S. Park, H. D. Na, J. W. Lim, J. J. Lee, and J. H. Joo, *Surf. Coat. Technol.*, **169-170**, 424 (2003).
- [12] H. D. Na, H. S. Park, D. H. Jung, G. R. Lee, J. H. Joo, and J. J. Lee, *Surf. Coat. Technol.*, **169-170**, 41 (2003).
- [13] Jungjoong Lee and Junghoon Joo, *Surf. Coat. Technol.*, **169-170**, 353 (2003).
- [14] Dong-Kak Lee, Jung-Joong Lee, and Junghoon Joo, *Surf. Coat. Technol.*, **171**, 24 (2003).
- [15] Dong-Kak Lee, Jung-Joong Lee, and Junghoon Joo, *Surf. Coat. Technol.*, **173-174**, 1234 (2003).
- [16] Bohwan Park, Dong-Ha Jung, Girak Lee, Jung-Joong Lee, and Jung-Hoon Joo, *Surf. Coat. Technol.*, **174-175**, 643 (2003).
- [17] D. H. Jung, H. Kim, G. R. Lee, B. Park, J. J. Lee, and J. H. Joo, *Surf. Coat. Technol.*, **174-175**, 638 (2003).
- [18] Yeonghun Han, S. J. Jung, J.-J. Lee, and J. H. Joo, *Surf. Coat. Technol.*, **174-175**, 235 (2003).
- [19] Dae-Hwan Kang, Dong-Kak Lee, Ki-Bum Kim, Jung-Joong Lee, and Junghoon Joo, *Appl. Phys. Lett.*, **84**, 3283 (2004).
- [20] S. J. Jung, Y. H. Han, B. M. Koo, J. J. Lee, and J. H. Joo, *Thin Solid Films*, **475**, 275 (2005).
- [21] H. Y. Lee, D. K. Lee, D. H. Kang, J. J. Lee, and J. H. Joo, *Surf. Coat. Technol.*, **193**, 152 (2005).
- [22] H. Kim, D. H. Jung, B. Park, K. C. Yoo, J. J. Lee,

- and J. H. Joo, Surf. Coat. Technol., **193**, 255 (2005).
- [23] Bohwan Park, Dong-Ha Jung, Hoon Kim, Keun-Cheol Yoo, Jung-Joong Lee, and Junghoon Joo, Surf. Coat. Technol., **200**, 726 (2005).
- [24] S. J. Jung, B. M. Koo, Y. H. Han, J. J. Lee, and J. H. Joo, Surf. Coat. Technol., **200**, 862 (2005).
- [25] Wonkyun Yang and Junghoon Joo, J. Kor. Phys. Soc. **54**, 971 (2009).
- [26] 배상현, 권득철, 윤남식 한국진공학회지 **17**, 426 (2008).
- [27] ESI CFD Inc, *CFD-ACE+ V2006 User manual*, ESI-CFD Inc, 2006, 361.
- [28] Paul A. Miller and Merle E. Riley, J. Appl. Phys. **82**, 3689 (1997).
- [29] Yuichi Setsuhara, Shoji Miyake, Yochi Sakawa, and Tatsuo Shoji, Surf. Coat. Technol **136**, 60 (2001).
- [30] Dong-Kak Lee, Jung-Joong Lee, and Junghoon Joo, Surf. Coat. Technol. **173-174**, 1234 (2003).
- [31] 김곤호, 양성채, *플라즈마 일렉트로닉스*, (주)교학사, 2006, 150.
- [32] K. H. Bai, D. S. Lee, and H. Y. Chang, Appl. Phys. Lett., **80**, 3907 (2002).
- [33] K. H. Bai and H. Y. Chang., Appl. Phys. Lett., **87**, 121502 (2005).
- [34] Bong-Yong Jung and Myung-Ho Kim, J. Kor. Inst. Met. Mater., **37**, 1522 (1999).
- [35] Peter Kaestner, Thorsten Michler, Hans Weidner, Kyong-Tschong Rie, and Günter Bräuer, Surf. Coat. Technol. **203**, 897 (2008).

Computational Fluid Dynamic Modeling for Internal Antenna Type Inductively Coupled Plasma Systems

Jung Hoon Joo*

*Department of Materials Science and Engineering & Plasma Materials Research Center,
Kunsan National University, Kunsan 573-701*

(Received April 27, 2009, Revised May 21, 2009, Accepted May 21, 2009)

CFD is used to analyze gas flow characteristics, power absorption, electron temperature, electron density and chemical species profile of an internal antenna type inductively coupled plasma system. An optimized grid generation technology is used for a complex real-scale models for industry. A bare metal antenna shows concentrated power absorption around rf a feeding line. Skin depth of power absorption for a system is modeled to 50 mm, which is reported 53 mm by experiments. For an application of bipolar plates for hydrogen fuel cells, multi-sheet loading ICP nitriding system is proposed using an internal ICP antenna. It shows higher atomic nitrogen density than reported simple pulsed dc nitriding systems. Minimum gap between sheets for uniform nitriding is modeled to be 39 mm.

Keywords : Numerical modeling, Inductively coupled plasma, Nitriding, Bipolar plate, Fuel cell

* [E-mail] jhjoo@kunsan.ac.kr