

### SiH<sub>4</sub>+Ar 혼합기체의 전자군 파라미터 해석

성낙진 · 김상남  
인천전문대학\*

#### The analysis on the electron swarm parameter in SiH<sub>4</sub>+Ar mixtures

Nak-Jin Seong, Sang-Nam Kim  
Incheon City Collcge

**Abstract** - This paper calculates and gives the analysis of electron swarm transport coefficients as described electric conductive characteristics of pure Ar, pure SiH<sub>4</sub>, Ar+SiH<sub>4</sub> mixture gases (SiH<sub>4</sub>-0.5%, 2.5%, 5%) over the range of E/N = 0.01~300[Td], P=0.1, 1, 5.0[Torr] by Monte Carlo the Backward prolongation method of the Boltzmann equation using computer simulation without using expensive equipment.

The results have been obtained by using the electron collision cross sections by TOF, PT, SST sampling, compared with the experimental data determined by the other author. It also proved the reliability of the electron collision cross sections and shows the practical values of computer simulation.

#### 1. 서 론

본 연구에서는 SiH<sub>4</sub>+Ar 혼합기체 중에서 몬테칼로 시뮬레이션, 볼츠만 방정식의 Backward prolongation 법에 의해 수치해석으로 전자에너지분포함수  $f(\epsilon)$ 을 구하고 전기전도 특성을 나타내는 전자이동속도(W)와 전리계수( $\alpha/N$ ), 종·횡축방향의 확산계수( $ND_L$ ,  $ND_T$ ), 전자의 특성에너지( $D_L/\mu$ ), 평균에너지 ( $\bar{\epsilon}$ )등의 전자수송특성을 SiH<sub>4</sub>+Ar 혼합기체 (SiH<sub>4</sub>+Ar 혼합기체 중에 있어서 SiH<sub>4</sub> 농도: 0.5%, 2.5%, 5%)에 대해서 E/N : 0.01~300[Td] [ E:전계, N:기체분자 수밀도, 1[Td] =  $1 \times 10^{-17}$  [V·cm<sup>2</sup>], N :  $3.5353 \times 10^{16}$  [cm<sup>-3</sup>] 0 [°C], 1 [Torr]에 해당 ]와 P<sub>0</sub> : 0.5, 1.0, 5.0 [Torr]범위에서 비등방성 산란을 고려하여 계산하여 전자수송특성을 고찰하였다. 그리고 전자충돌단면적의 타당성에 대하여 검토하고 평균에너지에 따른 전자에너지분포함수를 볼츠만 방정식에 의한 PT, TOF, SST의 전자 스왐 법과 몬테칼로 시뮬레이션으로 계산한 전자군 파라미터를 해석하였다.[1,2,3]

#### 2. MCS - BEq법

본 논문의 이론적인 해석은 몬테칼로법(MCS)과 볼츠만법(BEq)을 이용하여 전자에너지 분포함수와 전자수송계수(전자군 파라미터)를 구하는 것으로 이것은 [0~1]사이에 일정한 분포를 갖는 난수(Random number)를 이용하여 충돌의 종류, 산란후의 방향 및 비행시간 등을 결정하면서 전자의 운동을 반복 추적한다.

몬테칼로법은 난수를 취급하는 기법의 총칭으로 도박으로 유명한 모나코의 Monte Carlo에서 유래되었다. 확률분포에 있어서 난수(Random Number) 선택에 기초한 실험적 수학의 한 분야로 불규칙적인 운동을 모델화한 기법으로 매우 다양한 문제를 전자계산기에 발생시켜 Random한 실험결과를 해석하는데 유용한 수학적

모의 방법이다.[4]

전자군의 성질을 조사하기 위한 몬테칼로 시뮬레이션은 개개의 전자운동을 세밀히 계산하는 기법과 여러 샘플을 통해 전자군으로서의 특성을 구하는 기법으로 구성되어 있다. 방전공간 내에서 난수를 이용하여 각종 파라미터의 위치적 변동에 의해서 전자의 평균에너지와 전자 위치 및 시간의 함수로서 추적하여 해석하는 몬테칼로법은 전자사태에서 나타나는 개개의 전자를 추적하여 방전 파라미터의 동향을 조사하여 이들 전자의 물리량을 가상적으로 샘플링하고 그들 하전입자의 운동을 컴퓨터로 분석하여 전자군의 파라미터의 값을 확률적으로 결정하는 것이다.[4,5]

기체 중을 전계로부터 에너지를 얻어 이동하는 전자군 중의 전자는, 기체원자, 분자와 각종의 충돌을 반복한다. 이 전자군의 운동이나 기체원자·분자와의 충돌과정을 고찰하기 위해, 전자에너지 분포를 아는 것이 중요하다. 기체중의 전자군의 수송과정은 볼츠만 수송방정식에 의해 기술되고, 이 방정식을 해석하는 것에 의해 전자군의 특성을 나타내는 다양한(전자이동 속도등) 물리량을 얻을 수 있다. 기체중 전자 수송현상을 이해하기 위해서는, 전자에 관한 분포함수  $F(r,v,t)$ 를 아는 것이 필요하게 된다. 이 분자의 분포함수  $F(r,v,t)$ 는, 위치와 속도를 갖춘 6차원의 위상공간(x,y,z,v<sub>x</sub>,v<sub>y</sub>,v<sub>z</sub>)에 있어서 수밀도를 나타내는 것이고, 그 위상 공간에 있어서 연속식으로서 볼츠만 방정식으로 나타내어진다.[4]

본 시뮬레이션에서는 전계의 분포에 대응하는 전극간의 분해거리, 위치를 분해한 Sample, 그 때 전자가 도달하는 시간(Time), 전자의 종방향 거리(R\*R), 전자의 횡방향 거리(D<sub>LT</sub>) 및 그 점의 전자에너지 등과 전자계도에서 전리가 일어난 경우에 2차전자, 난수(Random Number : 13)등을 양극에 도달할 때까지 반복 추적하여 SPARK WORK STATION (SS-20)을 이용하여 시뮬레이션 하였다.

#### 3. 전자 충돌 단면적

##### 3.1 Ar 충돌단면적

Ar가스는 플라즈마 CVD, 가스레이저, 형광등 등에서 이용되며, 공학적 이용도 넓고 중요하다. 이 때문에 Ar 가스중의 전자의 운동을 아는 것은 대단히 중요하며, 현재까지 많은 실험적, 이론적 연구가 진행되고 있다. 그 중에서도, 전자 스왐 파라미터와 충돌 단면적에 관한 조사와 연구는 많이 행해진다.

본 논문에서는 Ar가스의 운동량 이행 단면적(이하 q<sub>m</sub>이라한다.)을 0.01~150(eV)에서 추정된 결과를 보고한다. 이것은 Ar가스의 충돌단면적의 Ramsauer Minimum 및 q<sub>m</sub>의 피크값을 포함한 것이다. Ar가스의 q<sub>m</sub>에서 현재 관심을 갖는 것은 Ramsauer Minimum 이 어느 eV정도에서 존재하고, 또한 그것이 어느 정도의 값을 갖는가 하는 점이다.

해석에 이용한 Ar의 전자 충돌 단면적은, 운동량 이행 단면적  $q_m$ , 전자 여기 단면적  $q_{ex}$ , 전리 단면적  $q_i$ 의 3종류이다. 이들의 충돌 단면적을 그림 3.1에 나타낸다. 단, 전자 여기 단면적  $q_{ex}$ 에 관해서는, 4종의 단면적을 총화의 형 ( $\sum q_{ex}$ )으로 볼 수 있다. 또한 부착 단면적  $q_a$ 도 나타낸다. 해리 단면적은 좁은 범위에 작은 값을 가지는 것을 알 수 있다.

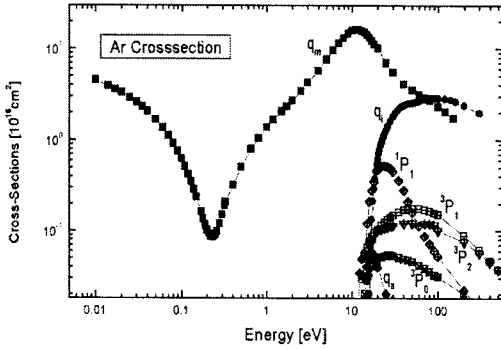


그림 3.1 Ar가스의 충돌단면적  
Fig. 3.1 The cross-sections in Ar gas

### 3.2 SiH<sub>4</sub> 충돌단면적

충돌 단면적은 전자의 거시적 특성을 이용하는데 기초적 자료로서 중요하며 전자수송특성에 관한 정보를 알 수 있고 에칭 가스에서는 여기 단면적( $q_{ex}$ )과 해리 단면적( $q_d$ )이 중요하다.[7] 충돌 입자간의 상호작용으로 기체 분자의 여기, 해리, 이온화 등의 반응으로 여기 단면적, 해리 단면적, 이온화 단면적 등으로 나타내며 전충 돌 단면적은 개개의 반응과정의 합으로 나타낸다. 본 연구에 이용한 전자 충돌 단면적은 Haller, Tossell(8)의 값을 이용하여 계산하였고 그림 3.2에 나타낸다. 본 해석에는 이항근사에 의한 볼츠만 해석을 이용하여 정리된 충돌 단면적을 이용했다. 이것은, 운동량 변화 단면적  $Q_m$ , 2개의 진동 여기 단면적  $Q_v$ , 전자 부착 단면적  $Q_a$ , 해리 단면적  $Q_d$ , 전리 단면적  $Q_i$ 의 총 6개의 충돌 단면적으로 되어 있지만[7] 전자 부착 단면적에 관해서는 고려하고 있지 않다.

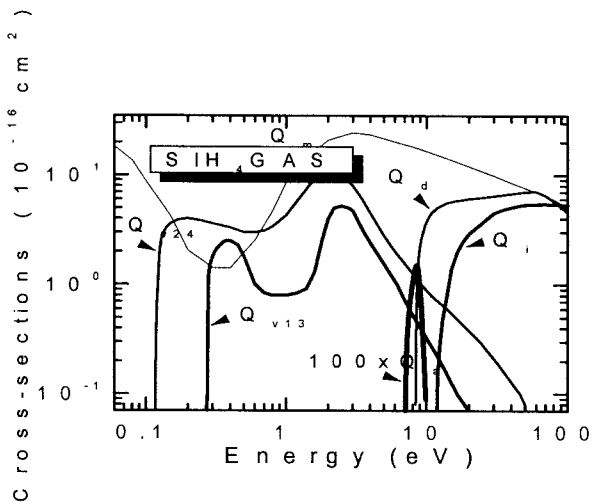


그림 3.2 SiH<sub>4</sub>가스의 전자충돌단면적  
Fig. 3.2 The cross-sections in SiH<sub>4</sub> gas

## 4. 결과 및 고찰

### 4.1 전자이동속도

그림 4.1의 전자이동속도(W)는  $E/N=0.01\sim 300$  [Td] 범위에서  $P=0.5, 1.0, 5.0$  [Torr]에 대하여 몬테 칼로 시뮬레이션법과 볼츠만법으로 계산한 것이다. 전자이동속도는  $E/N$ [Td]에 따라 거의 선형적으로 증가하며 Ar을 제외하고 부구배 특성을 나타낸다.

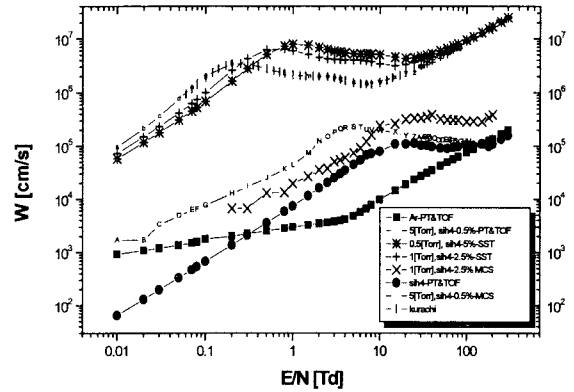


그림 4.1 전자이동속도  
Fig. 4.1 The drift velocity in SiH<sub>4</sub>+Ar

SiH<sub>4</sub> + Ar 혼합가스는 볼츠만 시뮬레이션에서  $E/N=0.2\sim 20$  [Td]에서 순수 SiH<sub>4</sub>가스가 부구배를 가지는 것과 마찬가지로 전계( $E/N$ )이 증가함에 따라 전자이동속도가 감소하는 현상, 즉 부구배(NDC : Negative Differential Conductivity)의 특성이 뚜렷하게 나타난다. 이것은 Ar의 충돌 단면적( $Q_m$ )이 0.2~15[eV] 부근에 넓은 Ramsauer minimum을 가지고 있으며 이곳에서 기체원자·분자와 충돌한 빈도가 작기 때문에 전계 방향의 평균 속도 값은 크게 된다.

### 4.2 종방향·횡방향 확산계수

그림 4.2의 종방향 확산계수는  $E/N=0.01\sim 300$  [Td]에서  $P=0.5, 1.0, 5.0$  (Torr)에 대해 몬테칼로 시뮬레이션법과 볼츠만법으로 계산한 것으로 확산계수  $D_L$ 과 기체분자수밀도  $N$ 과의 곱  $ND_L$ 을  $E/N$ [Td]의 함수로 나타내었다. 종방향 확산계수는 Ar가스와 SiH<sub>4</sub>가스에서 거의 전 영역에 걸쳐 일정한 값을 나타내었으며, 볼츠만법에 의한 실험 값에서는 Ar은  $E/N=30$  [Td]까지 서서히 감소하다  $E/N$ 의 증가와 함께 서서히 증가하며, SiH<sub>4</sub>는  $E/N$ 에 따라서 복잡하게 변화하는 구조를 나타내며, SiH<sub>4</sub> + Ar 혼합가스에서는 모두 부구배의 특성이 나타나며,  $E/N$ 이 증가함에 따라  $E/N=0.3$  [Td]까지 증가하다가 약간의 부구배를 보인 후에 서서히 증가하여 거의 같은 값을 나타낸다.

몬테칼로 시뮬레이션에 의한 종방향 확산계수는 그림 4.2에서 나타나듯이 압력이 갈수록 낮은  $E/N$ 에서 존재하며, 압력이 낮아질수록 보다 높은  $E/N$ 에서 나타나게 된다.  $E/N$ 이 커짐에 따라 전자는 큰 평균운동에너지 가지게 되어 전자의 무질서한 운동이 강하게 되고, 기체원자·분자와의 충돌빈도가 높게 되기 때문에, 전자군이 확산하는 것이 작게 된다. 따라서 이 영역에서  $ND_L$ 의 감소가 일어나게 된다고 할 수 있다.

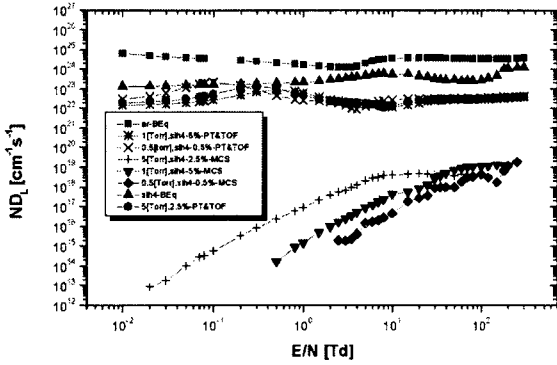


그림 4.2 종방향확산계수  
Fig 4.2 The longitudinal diffusion coefficients in SiH<sub>4</sub>+Ar

그림 4.3의 확산계수는  $D_T$ 를 기체분자수밀도  $N$ 과의 곱을 같은 방법으로 비교하여 나타내었다. Ar가스의 경우에는 가장 큰 값을 보이며, SiH<sub>4</sub>가스에서는 1(Torr)에서 SiH<sub>4</sub>를 0.5[%] 혼합한 몬테칼로 시뮬레이션과 거의 같은 값을 보인다. 이 값들은 모두  $E/N$ 에 의존하는 특성을 나타낸다.

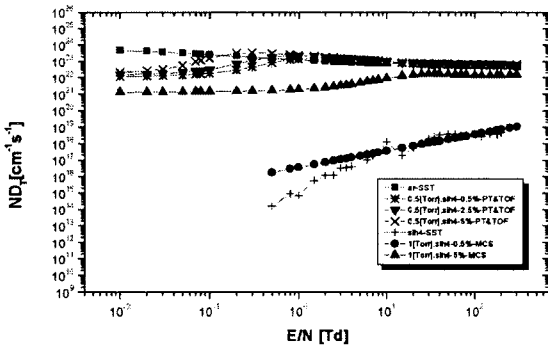


그림 4.3 횡방향확산계수  
Fig F.3 The transverse diffusion coefficients in SiH<sub>4</sub>+Ar gas

### 4.3 종방향 · 횡방향 특성에너지

그림 4.4와 그림 4.5는 종방향 확산계수와 이동도의 비인 종방향 특성에너지  $D_L/\mu$ 를  $E/N=0.01 \sim 300$  [Td]의 변화에 따라 나타낸 것이다.

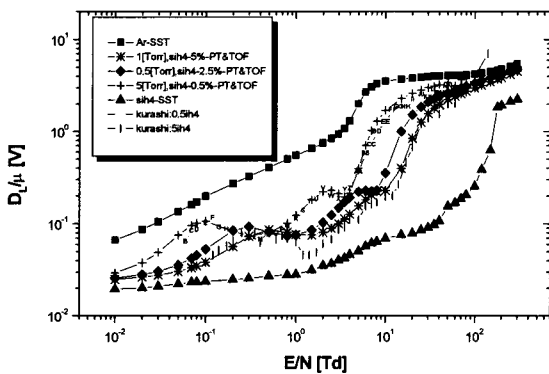


그림 4.4 종방향특성에너지  
Fig. 4.4 The longitudinal characteristic energy in SiH<sub>4</sub>+Ar gas

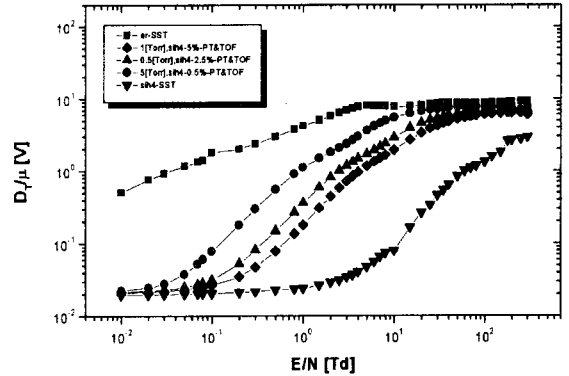


그림 4.5 SiH<sub>4</sub>+Ar 가스의 횡방향특성에너지  
Fig 4.5 The transverse characteristic energy in SiH<sub>4</sub>+Ar gas

여기서  $\mu$ 는  $\omega/E$  로서 이동도를 나타낸다. Ar가스에서 가장 큰 값을 가지며, SiH<sub>4</sub>가스는 작은 값을 가지고,  $E/N=10$  이상에서 그 이전에 완만하던 기울기가 급격해지는 것을 알 수 있다. 종방향특성에너지에서 나타나는 증가는 여기충돌에 의한 Drift 속도의 상승과 전리충돌에 의한 전자수 보존상태의 영향을 받는 것으로 생각된다.

종방향특성에너지와 횡방향특성에너지에 나타난 결과에 의하면, 그 값의 크기에 있어서 Ar과 SiH<sub>4</sub>가 각각 가장 큰 에너지와 가장 작은 에너지를 가지며, 종방향특성에너지는 SiH<sub>4</sub>+Ar 혼합가스에 있어서 매우 복잡한 상태를 나타내며, 종방향특성에너지와 횡방향특성에너지는  $E/N$ 에 의존하는 특성을 가지고 있다.

### 4.4 평균에너지

그림 4.6에 SST에 의한 SiH<sub>4</sub>+Ar가스의 평균에너지를, 그림 4.7과 그림 4.8에 MCS에 의한 SiH<sub>4</sub>+Ar가스의 평균에너지를, 그리고 그림 4.9에 SiH<sub>4</sub>가스의 평균에너지를 나타냈다. 그림 4.6에 나타낸 Ar가스는  $E/N=5$  [Td]까지 급격히 증가한후 그 이후에는 완만한 증가를 보이고 SiH<sub>4</sub>가스에서는  $E/N=2$  [Td]까지 완만한 증가를 보이다가  $E/N$ 이 증가함에 따라 증가한다. 또한, 그림 4.7, 그림 4.8에는 각각 SiH<sub>4</sub>가스를 0.5%, 5% 첨가한 SiH<sub>4</sub>+Ar혼합가스의 평균에너지를 나타냈으며 샘플링의 차에 의하여 음극과 양극 가까운 영역의 전자의 평균에너지는 영점으로부터 비탄성충돌이 일어날 에너지까지는 직선적으로 상승하여 비평형의 상태로 나타나고 그 밖의 영역에서는 거의 평형상태의 에너지값을 나타내었다

전자의 평균에너지( $\bar{\epsilon}$ )와 특성에너지( $D/\mu$ )의 관계는  $D/\mu = KT/e = 2\bar{\epsilon}/3e$ 의 관계이며 전자의 평균에너지( $\bar{\epsilon}$ )는 특성에너지의  $3e/2$ 배가 될 때 그 값이 일치한다.

또한, SiH<sub>4</sub>+Ar 혼합가스에 있어서는 압력이 낮은 (0.5Torr) 것이 큰 평균에너지 값을 가지며, SiH<sub>4</sub> 혼합비율이 높을수록 큰 평균에너지 값이 나타난다.

그림 4.7과 그림 4.8에서 있어서는 압력  $P=1$  (Torr)에서 측정하였다. 그림 4.7과 그림 4.8에서는 모두 저  $E/N$ 에서는 길이  $L$ 에 의존하고 있다는 것을 알 수 있으며,  $E/N$ 이 점차 커질수록  $E/N$ 이 낮을 때와는 달리 매우 불규칙한 평균에너지를 갖는다는 것을 안다. 그림 4.9에서는 그림 4.6에서 나타낸 것과 같이  $E/N$ 이 낮을 때는 안정적인 평균에너지 값을 가지나,  $E/N$ 이 높을 때는 불규칙한 평균에너지 값을 나타낸다는 것을 알 수 있다.

## 5. 결론

Ar가스의 운동량 이행 단면적( $q_m$ )을 0.01~150 [eV]에서 추정 한 결과는, 운동량 이행 단면적( $q_m$ )이 저 에너지영역( $\epsilon \leq 0.7\text{eV}$ )에서 Ramsauer Minimum인 것을 알 수 있다. 또한 이동속도(W)와 종방향 확산계수( $ND_L$ )에 있어서 이동속도(W)는 E/N에 따라 증가하는 것을 종방향 확산계수( $ND_L$ )는 E/N=5[Td]까지는 감소하다 그 이후에는 E/N=10[Td]까지는 급격히 증가하는 부구배(NDC : Negative Differential Conductivity)의 특성을 파악할 수 있었으며, Ar가스에 미량 SiH<sub>4</sub>가스를 혼합한 각 SiH<sub>4</sub>+Ar 혼합 기체중에 있어서의 이동속도(W)와 종방향 확산계수( $ND_L$ )는, 순수 Ar 가스에서의 이동속도(W)와 종방향 확산계수( $ND_L$ )에 비교해 큰 변화를 보이며, 이동속도(W)는 부구배(NDC : Negative Differential Conductivity)를 나타내었다

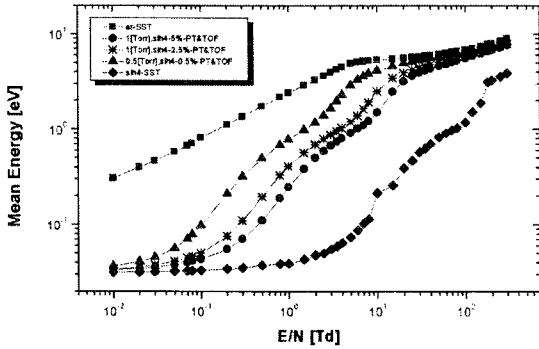


그림 4.6 SiH<sub>4</sub>+Ar 가스의 평균에너지  
Fig 4.6 The mean Energy in SiH<sub>4</sub>+Ar gas

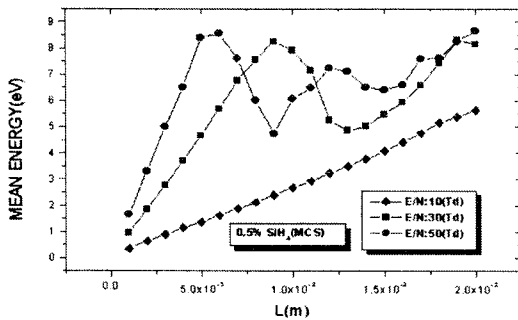


그림 4.7 SiH<sub>4</sub>+Ar 가스의 평균에너지  
Fig 4.7 The mean Energy in SiH<sub>4</sub>+Ar gas

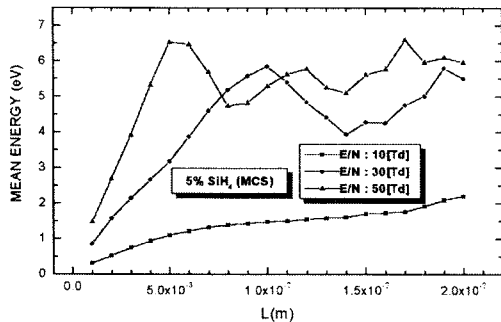


그림 4.8 SiH<sub>4</sub>+Ar 가스의 평균에너지  
Fig. 4.8 The mean Energy in SiH<sub>4</sub>+Ar gas

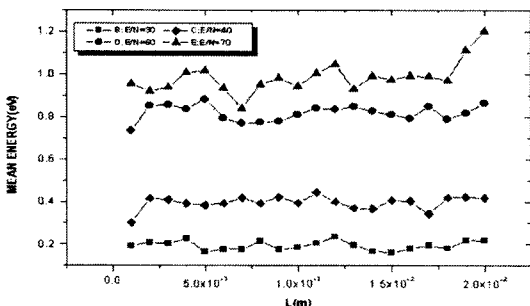


그림 4.9 SiH<sub>4</sub> 가스의 평균에너지  
Fig. 4.9 The mean Energy in SiH<sub>4</sub> gas

본 연구는 인천전문대학 교내 연구비 지원에 의한 논문임

## [참고문헌]

- 大森義行, 下妻光夫, 田頭博昭, "SiH<sub>4</sub> 가스의電子衝突斷面積およびスウオームベラメータ" 電氣學會研究會資料, ED-86-114, HV-86-34, 1988.
- 菅野卓雄 編著, "半導體プラズマプロセス技術", 産業圖書, pp. 38-50, 1993.
- 小沼光晴著 "プラズマと成膜の基礎", 日刊工業新聞社, pp. 13-20, 1993
- 氣體放電 シミュレーション技法(제140호), 1974.
- C. Jacoboni and P. Lugli, "The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation", Springer-Verlag Wien, pp.1-4, 1989.
- Philip. E. Luft, "Description of a Backward prolongation program for computin transport coefficients", JILA. information center report, No. 19, 1975.
- Tossell J.A. "MS-X $\alpha$  calculation of the elastic electron scattering cross sections and X-ray absorption spectra of CX<sub>4</sub> and SiX<sub>4</sub> (X=H, F, Cl)" J. chem. Phys, pp. 813-21, 1984.
- Pollock W. J, "Momentum Transfer and Vibrational Cross-sections in Non-polar Gases" Trans. Faraday. Soc., 64, pp. 2919-26, 1988.