

CF<sub>4</sub>-Ar 混合氣體에서 電子에너지분포함수

김상남\*, 성낙진  
시립인천전문대학

A Simulation of the Energy Distribution Function for Electron  
in CF<sub>4</sub>-Ar Mixtures Gas

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

**Abstract** - Electron swarm parameters in pure CF<sub>4</sub> and mixtures of CF<sub>4</sub> and Ar, have been analyzed over a range of the reduced electric field strength between 0.1 and 350[Td] by the two-term approximation of the Boltzmann equation(BEq.) method and the Monte Carlo simulation(MCS) The results of the Boltzmann equation and the Monte Carlo simulation have been compared with the data presented by several workers. The deduced transport coefficients for electrons agree reasonably well with the experimental and simulation data obtained by Nakamura and Hayashi. The energy distribution function of electrons in CF<sub>4</sub>-Ar mixtures shows the Maxwellian distribution for energy. That is,  $f(\epsilon)$  has the symmetrical shape whose axis of symmetry is a most probably energy

충돌단면적, 전리현상 또는 입자의 밀도, 속도, 에너지 분포함수 등 전자 집합체로서의 물리적 현상을 명확히 규명해야 한다.

2. 해석 방법

몬테칼로법은 2차대전기간 동안에 원자탄 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.

전계가 존재하는 공간의 방전 메카니즘에 있어서 전자는 전계에 의해서 높은 에너지를 갖게 되지만 전자에너지가 평형상태에 있지 않으므로 전자에너지분포를 추정하기는 매우 어렵다. 몬테칼로 시뮬레이션은 매우 유용하다. 전자군 시뮬레이션 결과는 FORTRAN77을 SPARC WORKSTATION을 이용하여 계산하였다.

1. 서 론

최근 국내외적으로 고도 산업과 경제 성장으로 전력 수요가 매년 증가하는 실정이다. 따라서 전력 전송의 고전압화, 대용량화 및 핵융합 등의 새로운 에너지 기술개발의 기초 과학 연구가 다각적으로 활발히 이루어지고 있는 추세이다. 한편 산업 발전에 따라 전력 계통의 대용량화, 송전 전압의 초고압화에 의하여 각종 전기 기기에 방전 현상이 증대한 영향을 미치게 되고 환경문제 등 여러 산업 분야에서 방전을 이용하려는 노력이 증가하고 있다. 따라서 기체 방전을 지배하는 메카니즘을 정확히 이해할 필요가 있으며 이를 위하여 이론적, 실험적 수치 해석적으로 많은 연구를 필요로 하고 있다[1]~[3].

최근 새로운 산업 응용분야에서 방전 플라즈마 응용기술이 폭넓게 이용되고 있다.[4]~[7] 특히 약 전리기체 방전 플라즈마 현상은 높은 에너지 밀도의 발생이 가능하게 하였으며, 제어핵융합으로 미래의 에너지 자원 개발, 반도체 박막공정, 예칭, plasma display, 기체 플라즈마 CVD(Chemical Vapor Deposition), 기체 Laser 등의 새로운 가공법에 대한 연구가 활발히 진행되고 있다.[8-11] 약전리 기체 방전 플라즈마 현상을 지배하는 전자 수송계수 특성에 대해 난수기술에 대한 다변수 문제의 정량적 수치해석과 확률적 요소를 포함한 컴퓨터 시뮬레이션 및 실험적 방법으로 많은 연구가 이루어지고 있다.[12][13] 약전리 기체 플라즈마의 연구는 전자 이온의 하전입자와 중성의 원자 분자 등으로 구성되는 이들 각 입자간의 상호작용으로 나타나는 매우 복잡한 현상이다. 이들 하전입자의 성질을 이해하기 위해서는 입자간의 이동 혹은 확산, 분자와의 충돌과정,

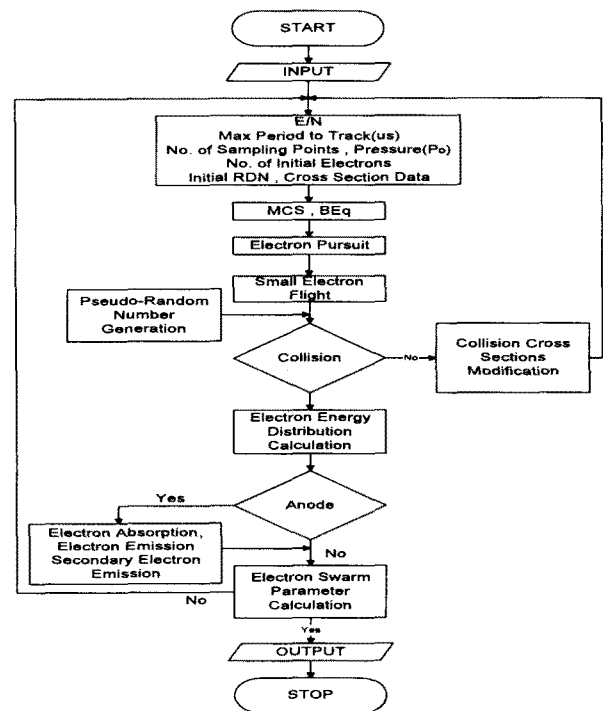


그림 2.1 전자 시뮬레이션 흐름도  
Fig. 2.1 Flowchart of the electron simulation

### 3. 전자충돌 단면적

#### 3.1 CF<sub>4</sub> 기체에서 전자의 충돌단면적

본 연구에 이용한 CF<sub>4</sub>의 전자충돌단면적은 운동량변환단면적( $Q_m$ ), 진동여기단면적( $Q_{v1}$ ,  $Q_{v2}$ ), 부착 단면적( $Q_a$ ), 여기 단면적( $Q_{ex}$ ), 해리단면적( $Q_d$ ) 및 전리단면적( $Q_i$ )으로 구성되어 있다.

이 CF<sub>4</sub>의 전자충돌단면적은 운동량 변환단면적( $Q_m$ )의 0.1~0.8 eV범위에서 Ramsauer Townsend Minimum(RTM)을 가지며 이 지점에 큰 진동 여기단면적( $Q_{v1}$ ,  $Q_{v2}$ )이 존재하기 때문에 단면적 결정에 어려움이 있다. 또한 전자여기( $Q_{ex}$ )의 Threshold에너지 부근에 비교적 큰 부착단면적을 가지고 있으며, 이것이 전자부성특성을 나타내는 원인이 된다. 그리고 해리단면적( $Q_d$ )과 전리단면적( $Q_i$ )은 그림 3.1과 같은 Nakamura의 실험치를 이용하였다.

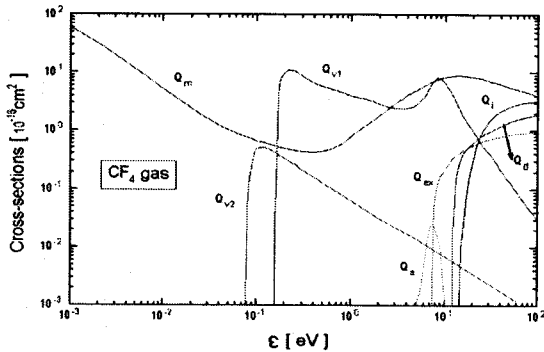


그림 3.1 CF<sub>4</sub> 기체에서 전자의 충돌단면적  
Fig 3.1 Collision cross sections for electrons in CF<sub>4</sub>

#### 3.2 Ar 기체에서 전자의 충돌단면적

시뮬레이션에서 그림 3.2의 전자충돌 단면적을 운동량 변환 단면적( $Q_m$ ), 여기 단면적( $Q_{ex}$ ), 전리 단면적( $Q_i$ )으로 나타내었다.

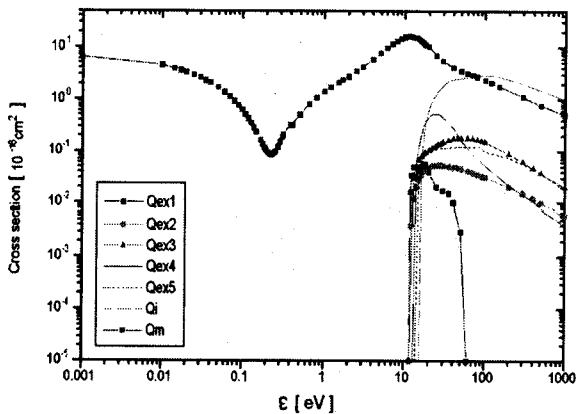


그림 3.3 Ar 기체에서 전자의 충돌단면적  
Fig 3.3 Collision cross sections for electrons in Ar

이 Ar의 전자 충돌 단면적은 저에너지 영역(0~0.23eV)에서 Bell과 Scott[14]의 계산값을 이용하였고 전자에너지 0.136~54.4 eV영역의 범위에서는 Arati Dasgupta[15]의 실험값을, 60~150 eV범위에서는 Fon[16]의 측정값을 이용하였다. 그리고 여기 단면적( $Q_{ex}$ )은 허용대 준위의 여기 단면적 ( $^3P_2$ ,  $^3P_1$ ,  $^3P_0$ ,  $^1P_1$ )과 금지대 준위의 여기단면적(13.0-13.9 eV)으로 분류하여 Nakamura와 Kurachi[15], Chutjian [16]등의 측정값을 이용하고 전리 단면적은 Donald Rapp의 측정된 결과를 이용하였다.

### 4. 결과 및 고찰

#### 4.1 CF<sub>4</sub>, Ar 의 에너지 분포함수

그림 4.1은 순수 CF<sub>4</sub> 가스의 전자수송계수에 직접 관련되는 물리량인 전자에너지분포  $f(\epsilon)$ 를  $E/N=100$  [Td]에 대하여 나타낸 것이다.

전자에너지분포는 전자가 전계로부터 에너지를 받고 원자 또는 분자와의 충돌에 의하여 에너지를 잃는 균형 관계에서 결정되는 중요한 물리량으로 플라즈마 프로세싱에 유용하게 이용되고 있다.

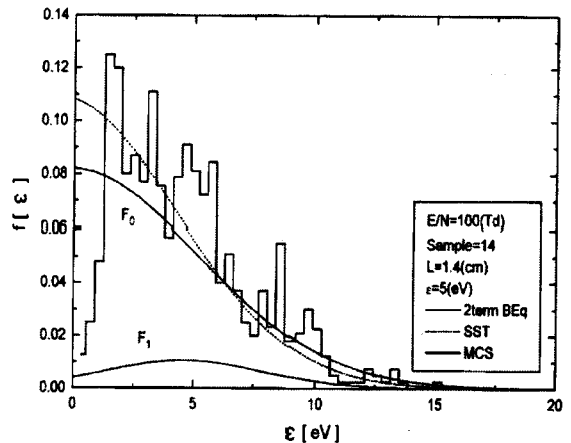


그림 4.1 CF<sub>4</sub> 기체에서 전자의 에너지 분포함수  
Fig 4.1 Distribution function for electrons in CF<sub>4</sub>

전자가 전계에 의하여 운동할 때 각 E/N에 대한 Sample(14, 16, 10), 거리(1.4, 1.6, 1 cm), 평균 에너지(5, 7.6, 9.4 eV)범위에서 MCS법으로 전자를 추적하여 나타난 전자에너지분포  $f(\epsilon)$ 는 볼츠만 2항 근사식에 의한 BEq의 SST의 계산값과 전반적으로 큰 차이를 나타내었다]

$f(\epsilon)$ 의 초기값에서는 전자에너지가 증가하고 높은 전자에너지 측에서는 감소하는 경향이 나타났다. 이와 같은 현상은 CF<sub>4</sub> 기체의 진동 여기충돌과 진동 때문에 나타나는 것으로 생각된다.

한편 저온 플라즈마 중의 전자에너지분포는 전계효과에 의하여 Maxwell-Boltzmann분포가 높은 에너지 측으로 이동하고 기체입자와의 비탄성충돌 threshold 전압 이상에서는 에너지분포가 감소하는 것으로 나타났고

일반적으로 박막작성(薄膜作成)에 사용되는 저온 플라즈마 중의 전자의 에너지분포함수는 Maxwell-Boltzmann 분포로 가정한다. 이것은 E/N 영역에서는 전자여기나 전리 등의 비탄성충돌이 급격히 감소되어 나타나는 현상으로서 민감한 반응으로 여겨진다.

MCS법에 의하여 계산한 에너지분포함수와 볼츠만 방정식의 수치해석에 의한 결과는 E/N = 100 [Td]에서 큰 차이가 나타났다. E/N이 증가할수록 고에너지 전자가 증가함을 알 수 있고 평균에너지 값도 상승한다. 그러나 전자밀도 (전자에너지 분포함수 곡선과 X축과 이루는 면적)는 E/N이 증가할수록 감소한다.

전계가 인가될 때 기체 중을 이동하는 전자군의 에너지분포함수는 전자 각각의 에너지에 대한 확률밀도, 전자와 분자사이의 각종 충돌단면적과 방전현상으로 나타나는 전자수송특성에 직접 관련되는 물리량이다. 하전입자는 여러 종류의 에너지성분을 갖는 기체분자가 열평형 상태에 있는 경우에 에너지크기와 온도에 의존하는 방전공간의 등방적인 맥스웰-볼츠만 에너지분포함수이다. E/N=10, 100 Td에 대하여 전자가 운동할 때 Sample(15, 12), 거리(1.5, 1.2 cm), 평균에너지(0.6, 5 eV)의 범위에서 MCS법으로 추적하여 전자에너지분포함수  $F(\epsilon)$ 를 구하였다.

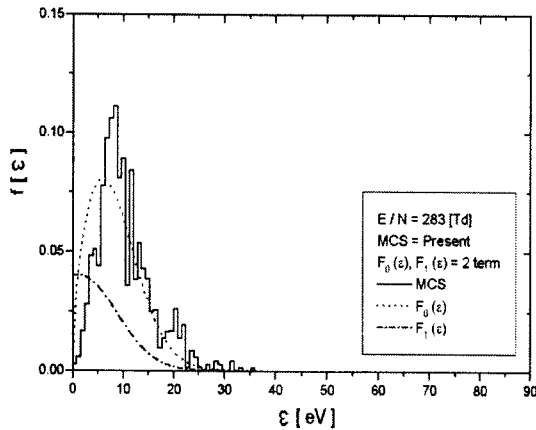


그림 4.2 Ar 기체에서 전자의 에너지 분포함수  
Fig 4.2 Distribution function for electrons in Ar

$F(\epsilon)$ 의 초기값에서는 전자에너지가 증가하고 높은 에너지측에서는 감소하는 경향이 나타난다. 이러한 현상은 진동여기충돌과 진동여기단면적의 공명효과 때문에 나타나는 것으로 생각된다.

한편 각각의 압력에 대한 분포함수의 수치는 평균에너지의 값에 대한 값과 일치하는 경향을 보이고 있음을 알 수 있다. 이것은 분포함수가 평균에너지를 하나의 변수로 함을 의미한다.

그림 4.2와 그림 4.3은 순수 Ar기체에서 탄성 및 비탄성산란을 고려하여 압력 P=0.1 Torr에서 E/N을 가변하여 전자에너지분포  $F(\epsilon)$ 를 MCS법과 BEq의 볼츠만 2항 근사해석으로 나타낸 것이다.

전자가 전계에 의해서 진행할 때 샘플 12, 거리

L=0.6 [cm], E/N=283, 566 [Td] 범위에서 MCS법으로 전자를 추적한 결과 전자에너지분포는 평형 및 비평형 상태로 변한다. 따라서 전자에너지분포함수의 계산은 평균에너지의 값이 각각  $\bar{\epsilon}=10.3$ ,  $\bar{\epsilon}=14.5$  eV에서 평형상태를 나타낸 것이다. 그림 4.19로부터 알 수 있는 것과 같이 E/N=283 Td에 전자가 여기로 인하여 에너지를 잃어버린 값이 다른 E/N에 비하여 큰 값으로 비평형영역이 크게 나타났다.  $F(\epsilon)$ 의 값은 초기에너지에서는 증가하고 전자에너지의 값이 6.3 eV 범위에서 평형상태의 영역이 나타났으며 그이상의 전자에너지는 감소하는 경향이 나타났다. 또한 MCS법에 의하여 계산한 에너지분포함수와 볼츠만 방정식의 수치해석에 의한 결과는 큰 차이가 나타났다. 볼츠만 2항 근사해석에서 등방성분  $F_0(\epsilon)$ 에 대하여 비등방성분  $F_1(\epsilon)$ 의 값이 적은 결과를 나타내었으며 MCS법에 따른 결과 전자의 수와 에너지가 낮게 됨에 따라서 양극에 흡수되는 전자의 에너지분포는 증가하고 에너지가 증가함에 따라서  $F(\epsilon)$ 은 감소하여 38 eV이상의 에너지에서 거의 일치하였다.

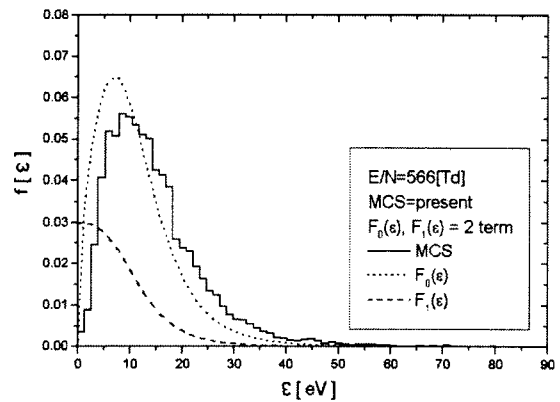


그림 4.3 Ar 기체의 전자의 에너지 분포함수  
Fig 4.3 Distribution function of electron in Ar

#### 4.2 CF<sub>4</sub>-Ar 의 에너지 분포함수

그림 4.4과 4.5는 E/N=50 Td에서 CF<sub>4</sub>기체가 0.1%와 5%가 함유된 혼합기체에서 전자의 에너지 분포함수를 나타낸 것으로 그림 4.4에서  $F(\epsilon)$ 의 초기값에서는 전자에너지가 증가하고 높은 전자에너지 측에서는 감소하는 경향이 나타났다. 이와 같은 현상은 CF<sub>4</sub>기체의 진동 여기충돌과 진동 여기단면적의 공명효과 때문에 나타나는 것으로 생각된다.

그림 4.5에서도 전자에너지 분포는 전계 효과에 의하여 Maxwell-Boltzmann 분포가 높은 에너지 영역으로 이동하고 기체입자와의 비탄성충돌 Threshold 전압 이상에서는 에너지분포가 감소하는 것으로 나타났고 일반적으로 박막작성(薄膜作成)에 사용되는 저온플라즈마 중의 전자의 에너지분포함수는 Maxwell-Boltzmann 분포로 가정한다. 이것은 E/N=50 Td영역에서는 전자여기나 전리 등의 비탄성충돌로 급격히 감소되어 나타나는 현상으로서 민감한 반응으로 여겨진다.

본 연구는 시립인천전문대학 교내 연구비 지원에 의한 논문임

### 참고 문헌

- [1] H. Itoh, Y. Miura, N. Ikuta, Y. Nakao and H. Tagashira, "Electronswarm development in SF<sub>6</sub>: I. Boltzmann equation analysis" Phys. D: Appl. Phys 21, pp.92-930, 1988.
- [2] 電氣學會技術報告, "氣體放電시뮬레이션技法" 第140號, 1974.
- [3] 谷口敏幸 *et al.*, "볼츠만方程式による運動量變換斷面積の推定に關して." 放電研究會資料, ED-86-116, pp.39-49, 1986.
- [4] Flamm D. L., "Plasma Processing of Semiconductors" Williams P F, NATO ASI series, pp.1-22. 1997.
- [5] 小沼光晴著 "플라즈마와成膜의基礎", 日刊工業新聞社, pp. 13-20, 1993.
- [6] 武田進, "氣體放電의基礎", 東明社, pp. 24-25, 1974.
- [7] 奥田孝美, "氣體플라즈마現象", コロナ社, pp.21-33, 1975. 상
- [8] 山本賢三, 奥田孝美, "電離氣體", コロナ社, pp. 161-197, 1977.
- [9] 武田進著, "플라즈마의基礎", 朝倉書店, pp.17- 58, 1976.
- [10] 森正武, "Fortran 77 數値計算 프로그램밍"(岩波書店), pp. 41-44, 1995.
- [11] 몬테칼로法とシミュレーション(培風館), 1989.
- [12] 市川行和, 高柳和夫, 島材勲, "衝突의理論(上下)", 吉岡書店, pp. 192, 1975.
- [13] 高柳和夫, "電子, 原子, 分子의衝突", 培風館, pp.51-69, 1978.
- [14] K. L. Bell, N. S. Scott and M. A. Lennon, "The Scattering of low-energy electrons by Argon atoms" J. Phys. B: At. Mol. Phys.17, pp. 4757 - 4765, 1984
- [15] Y. Nakamura and M. Kurachi "Electron Transport Parameters in Argon and its momentum transfer cross section" J. Phys.21, pp.718-723, 1988
- [16] A. Chutjian and D. C. Cartwright, "Electron excitation of electronic states in Argon at incident energies 16 and 100 eV" Phys. Rev. A. Vol. 23, No. 5, pp.2178-2187, 1981.

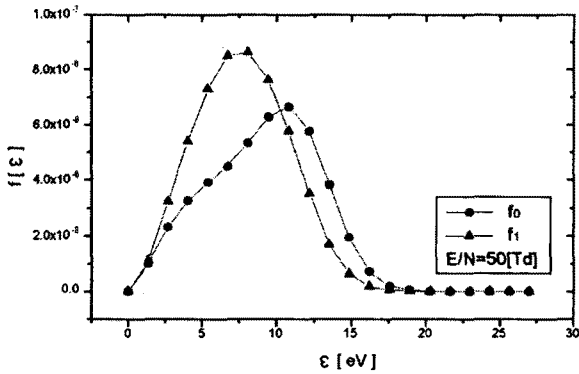


그림 4.4 CF<sub>4</sub>-Ar 혼합기체에서 전자의 에너지 분포함수  
Fig 4.4 Distribution function for electrons in CF<sub>4</sub> mixtures

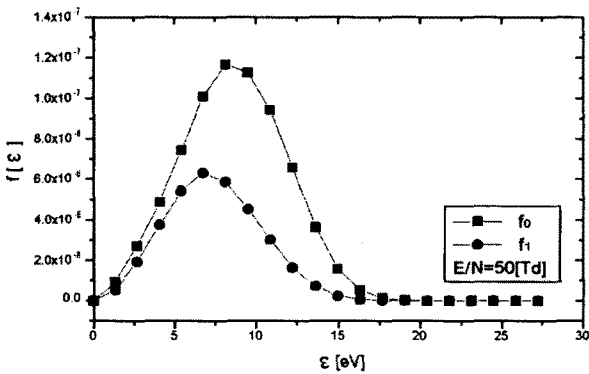


그림 4.5 혼합기체에서 전자의 에너지 분포함수  
Fig 4.5 Distribution function for electrons in CF<sub>4</sub> mixtures

## 5. 결론

본 논문에서는 2항 근사의 볼츠만 방정식과 몬테칼로법에 의하여 순수 Ar에 미량의 CF<sub>4</sub>를 혼합한 기체 중에서 전자군 수송계수와 전자에너지 분포함수를 시뮬레이션에 의해 정량적으로 계산하였으며, 그 결과 다음과 같은 결론을 얻었다.

CF<sub>4</sub>-Ar 혼합기체의 에너지 분포함수는 초기 에너지에서는 증가하고 그 이상의 전자에너지에서 감소하는 경향이 나타났다. 따라서, 본 연구에 이용한 운동량변환 단면적, 여기 단면적, 진동여기 단면적 및 전리·부착 단면적 등의 타당성이 밝혀졌다.

이처럼 컴퓨터를 이용한 시뮬레이션으로 MCS법과 볼츠만법에 의한 결과값은 실험값과 거의 일치하는 것으로 최근에 공학적으로 유효한 수단이 되고 있으며 우수한 프로그램이라는 것이 입증됨으로써 실험에 드는 비용 및 시간을 크게 절약할 수 있고 CF<sub>4</sub> 플라즈마를 이용한 기관 가공 기술, 반도체의 박막 공정, 플라즈마 에칭 기술, Plasma CVD의 활용 및 기초적인 물성 data를 얻는데 크게 기여할 것으로 판단되어진다.