

MCS-BEq에 의한 SiH₄ 電子輸送特性

성낙진* 김상남
시립인천전문대학

Electron Transport Characteristics in SiH₄ by MCS-BEq

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

Abstract - This paper describes the electron transport characteristics in SiH₄ has been analysed over the E/N range 0.5~300[Td] and Pressure value 0.5, 1, 2.5 [Torr] by a two-term approximation Boltzmann equation method and by a Monte Carlo simulation.

The motion has been calculated to give swarm parameters for the electron drift velocity, diffusion coefficient, electron ionization, mean energy and the electron energy distribution function.

The electron energy distribution function has been analysed in SiH₄ at E/N=30, 50[Td] for a case of the equilibrium region in the mean electron energy and respective set of electron collision cross sections.

The results of Boltzmann equation and Monte carlo simulation have been compared with experimental data by Pollock, Ohmori, cottrell and Walker.

1. 序 論

最近에 各種 氣體플라즈마를 使用한 半導體製造 프로세싱 技術이 많이 使用되고 있다. Plasma CVD 技術에서는 SiH₄, SF₆, CF₄, SiH₄+Ar, CF₄+N₂ 같은 分子들이 자주使用되며[1], 그 중에서도 SiH₄(mono-silane)가스는 플라즈마 CVD (Chemical Vapor Deposition)에 의한 Silicon 薄膜成形, 液晶驅動用 薄膜트랜지스터, 超LSI用 絶緣膜, 半導體의 에칭工程 및 機能性 薄膜의 生成등 工業적으로 利用되고 있으며 그리고 이것은 라디오파(radio wave) 및 마이크로파 (micro wave)電界로 勵起시켜 電子와 SiH₄ 分子와의 衝突로 SiH₄ 分子의 解離反應을 거쳐 水素化 非晶質실리콘(a-SiH)을 製造할 때 原料가스로 利用된다[2],[3],[4]. 그러므로 폭넓은 分野에 活用되는 SiH₄ 가스의 電子群의 性質을 糾明하는 것은 매우 중요하다고 할 수 있다. 電子群 파라미터 特性으로는 電子移動速度, 特性에너지, 縱方向擴散係數, 橫方向擴散係數, 電離係數, 電子平均에너지, 電子에너지 分布函數 등이 있다. 더 나은 프로세싱을 위해 플라즈마를 理解하고 디자인하기 위해 이러한 分子들에 대한 電子 衝突斷面積의 正確한 知識이 必要하게 되었다. 原子, 分子와 電子의 衝突에 관한 연속적인 反應에 있어서 弱電離 플라즈마의 特性을 이해하는 것은 플라즈마의 詳細한 모델을 設定하는데 중요하다. 따라서 이들에 관한 研究는 高速컴퓨터의 性能向上

과 數值的 解釋方法의 精巧함으로 因하여 革新的으로 電子群 파라미터 研究의 正確성과 信賴性이 높은 領域까지 向上되고 있다. 本 研究에서는 電子의 非平衡狀態에서 SiH₄가스의 衝突斷面積(q_m, q_v, q_a, q_i, q_a 등)을 Haller, Tossell 등이 결정된 값을 이용하여 E/N : 0.5~300[Td] (E : 電界, N : 氣體 分子數 密度, 1Td=1×10¹⁷ V · cm², N : 3.5353×10¹⁶cm⁻³ 0℃ 1 Torr에 해당)와 壓力 P₀ : 0.5, 1, 2.5[Torr] 範圍에서 非等方性 散亂을 考慮하여 計算하고 그 結果를 Pollock[5], Ohmori, Cottell and Walker[6]의 實驗값과 比較하여 電子輸送特性을 考察하였다. 그리고 電子衝突斷面積의 妥當성에 대하여 檢討하고 平均에너지에 따른 電子에너지 分布函數를 볼츠만 方程式과 몬테칼로 시뮬레이션으로 計算한 電子輸送特性을 解析하였다.

2. 解析 方法

2.1 MCS법

MCS은 亂數(Random Number)를 이용하여 衝突의 種類, 散亂 後의 방향 및 비행시간 등을 결정하면서 전자 의 운동을 反復 追跡한다. 또한 電子群의 성질을 조사하기 위한 몬테칼로법은 전자계내의 전자운동상태와 분자의 衝突散亂確率을 고려하여 電子, 이온의 상태량을 추적하는 것을 기본으로 하여 입자를 확률현상의 난수로 모의하는 방법을 말한다. 사용하는 난수는 컴퓨터에서 발생하는 [0~1]사이의 擬似亂數(Pseudo random number)이다.[7][8]

MCS은 確率論의인 技法을 利用하기 때문에 얻어진 結果로 부터 統計的인 分散이 생기는 短點이 있다. 이 때문에 信賴되는 파라미터를 求하기 위해서는 충분한 샘플수를 確保할 必要가 있다.

電子群에 대한 觀測方法으로는 TOF, PT, SST 등이 있다. 몬테칼로 시뮬레이션에 있어서도 data 샘플링을 이들 觀測法에 의해서 행한다. 3종의 觀측법 中에 PT, SST에서는 計算을 행한 電子數가 그대로 샘플수로 生成되어 얻어지지만 TOF에서는 位置와 時間을 같이 지정하기 때문에 샘플수는 작게 된다. 더욱이 에너지 分布를 求하는 경우 샘플수는 점점 작게 되고 統計的 變動을 많이 包含한 結果가 되기 쉽다. 그것을 防止하기 위해 電子數를 많게 計算하는데 그것에 比例하여 計算機 時間도 增加한다.

2.2 BEq법

氣體 中の 放電現象을 原子論的인 立場에서 보면, 相互 衝突을 되풀이 하는 荷電粒子 즉 電子, 原子, 分子, 이온에서 成立되며, 이들 荷電粒子는 電子群의 速度와 位置 및 時間에 따라 分流할 수 있는데, 하전입자가 熱平衡狀態에 있는 경우를 제외하고는 전자의 運動中 衝突에 의한 任意的 速度와 任意的 位置에 있는 電子의 數가 時間에 따라 變化한다.

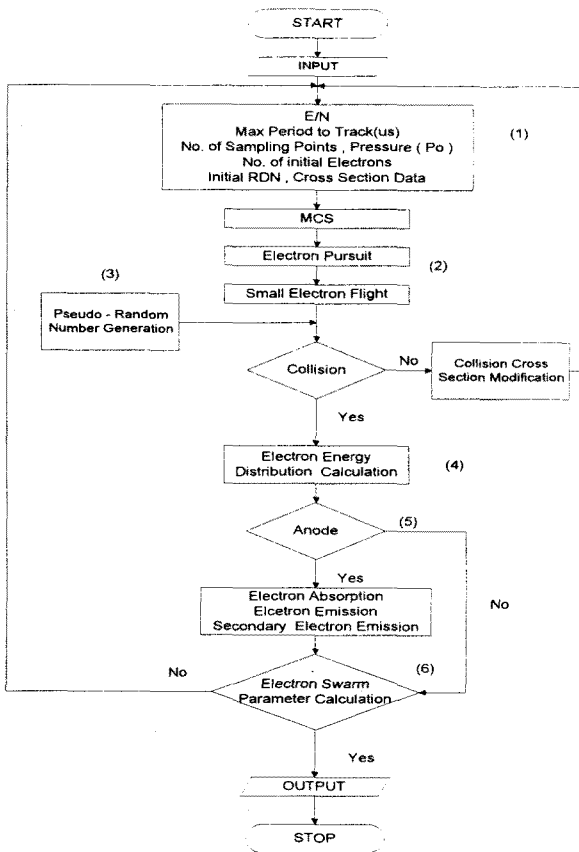


그림 2.1 몬테칼로 시뮬레이션의 순서도
Fig 2.1 Flowchart for Monte Carlo simulation

荷電粒子 각각의 速度는 각각 다른 時間 t 와 더불어 變化하므로 일반적으로는 位置空間과 速度空間을 一致시킨 位相空間과 分布函數 概念을 導入하여 位置벡터 $\vec{r}=(x, y, z)$, 速度벡터 $\vec{v}=(v_x, v_y, v_z)$, 時間을 t 로 놓았을 때, 電子의 位置 $\vec{r}-(\vec{r}+d\vec{r})$, 速度 $\vec{v}-(\vec{v}+d\vec{v})$ 의 範圍에 있는 微小 空間에 存在하는 粒子數를 dn 이라 하면

$$dn = f(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{r} \cdot d\vec{v} \quad \dots\dots\dots(1)$$

로 나타낼 수 있다.

여기에서 $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ 는 荷電粒子의 速度分布函數이다. 볼츠만 方程式을 간단히 定理하면 다음과 같이 정리할 수 있다

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + \vec{a} \cdot \nabla_{\vec{v}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad \dots\dots\dots(2)$$

위 식에서 보면 電子群의 任意的 位置와 速度 및 時間을 갖는 電子數 密度는 位置 變化에 따른 密度와 電界의 速度 變化에 의한 密度 그리고 衝突로 나타나는 速度 變化에 따른 密度의 變化로 나타낼 수 있다는 것이다.

3. SiH₄ 電子衝突 斷面績

本 研究에 이용한 SiH₄의 電子 衝突 斷面績은 Haller[10], Tossell[12]의 값을 利用하여 計算하였고 그림 1에 나타내었다. 電子의 巨視的 特性을 理解하는데 衝突斷面績은 基礎的 資料로서 이용된다. 또한 氣體分子에 대한 電子의 衝突 斷面績은 電子의 에너지에 의해서 變化한다. 따라서 衝突 粒子間의 相互作用으로 氣體分子의 勵起, 解離, 이온化 등의 반응으로 勵起斷面績, 解離斷面績, 이온化 斷面績 등으로 나타내며 全衝突 斷面績은 개개의 反應過程의 疊으로 나타낸다.

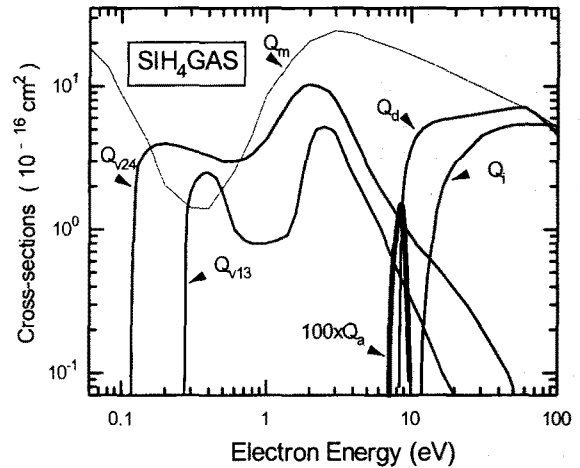


그림 4.1 SiH₄가스의 전자충돌단면적
Fig. 4.1 Collision cross section of electrons in SiH₄ gas

4. 解析結果 및 考察

4.1 電子移動速度

電子와 SiH₄ 分子와의 低 에너지 領域에 있어서의 非彈性 衝突이 그림2에 나타난 電子移動速度에 매우 큰 영향을 준다고 여겨진다.^[11]

그림 4.1에서 SiH₄ 가스의 運動量 變換 斷面績(Q_m)은 0.3~2.5[eV]附近에 넓은 Ramsauer minimum 과 勵起에 커다란 振動 勵起 斷面績이 존재하므로 振動勵起衝突에 의해서 낮은 에너지대의 電子가 많기 때문에 電子에너지를 커다란 循環이 발생하고 緩和時間의 減少로 各各의 壓力 P에 따른 E/N : 15~80[Td] 領域에서 전계 E/N이 증가함에 따라 電子移動速度가 감소하는 現象 즉 負勾配(NDC : Negative Differential Conductivity)傳導度의 特性을 나타내었다.

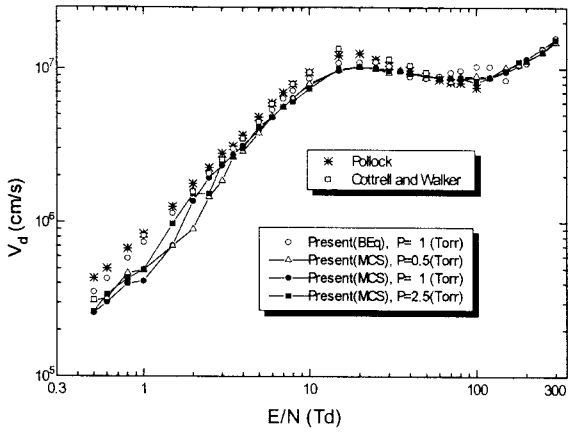


그림 4.1 SiH₄ 가스에서 電子移動速度
Fig. 4.1 Drift velocity of electrons in SiH₄ gas

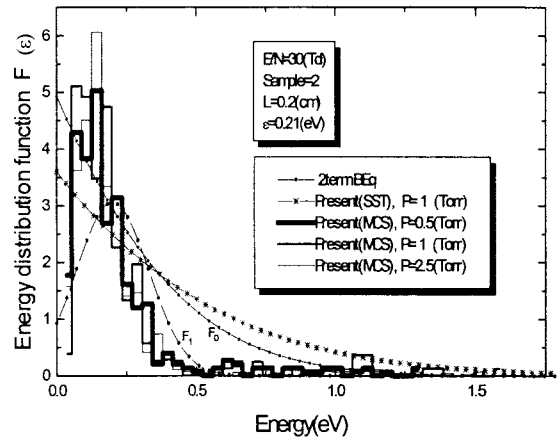


그림 4.3 SiH₄ 가스에서 電子에너지 分布函數(E/N=30)
Fig. 4.3 Energy distribution function of electrons in SiH₄ gas(E/N=30)

4.2 電離係數

本 研究에서는 60[Td]이하에서는 電離가 일어나지 않았다. 그리고 압력이 1[Torr] 일 때는 계산값과 실험값이 거의 일치하였으나 壓力이 높아질 때는 E/N : 150[Td] 이상에서 急激히 電離係數의 壓力 依存性이 나타남을 볼 수 있다. 이것은 氣體壓力의 증가에 수반되는 振動勵起 상태에 있는 SiH₄ 분자의 밀도가 증가되는 것으로 판명 된다.^[7]

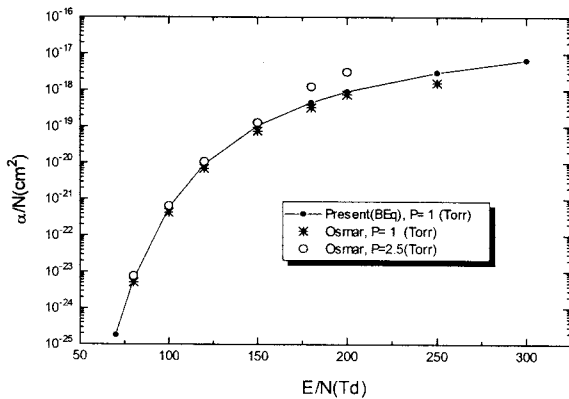


그림 4.2 SiH₄ 가스에서 電離係數
Fig. 4.2 Ionization coefficients in SiH₄ gas

4.3 에너지 分布函數

電子에너지分布 F(ε)는 그림 4.3과 4.4에서 彈性 및 非彈性衝突을 고려하여 E/N=30, 50[Td] 및 壓力 P : 0.5, 1, 2.5[Torr]에 대하여 나타내었다. 그림 9, 10에서 나타나듯이 MCS로 追跡하여 나타난 電子에너지分布는 非平衡狀態로 이 때의 平均에너지 값이 각각 $\bar{\epsilon} : 0.21[eV]$, $\bar{\epsilon} : 0.64[eV]$, Sample(2, 16), 距離(0.2, 1.6[cm])로 BE^[8]법과 SST^[8]법의 계산값과 全般的으로 差異를 나타내었다. 또한 勵起로 因하여 電子의 에너지를 잃어버리는 것이 크면 非平衡 領域도 크게 나타난 것으로 생각된다.

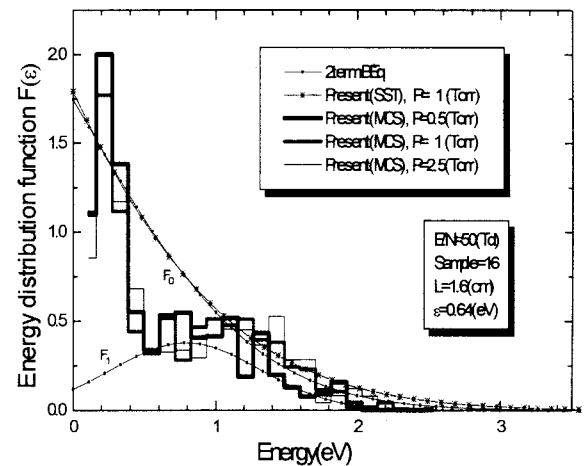


그림 4.4 SiH₄ 가스에서 電子에너지 分布函數(E/N=50)
Fig. 4.4 Energy distribution function of electrons in SiH₄ gas(E/N=50)

5. 結 論

本 論文에서는 SiH₄ 가스의 電子 衝突 斷面積을 利用하여 E/N:0.5~300[Td], 壓力P:0.5, 1, 2.5[Torr]範圍에서 放電과라미터의 特性을 非平衡 狀態에서 몬테칼로 시뮬레이션과 볼츠만 方程式으로 解析한 結果 다음과 같은 結論을 얻었다.

1. SiH₄ 플라즈마의 電子移動速度(V_d)의 전체적인 변화는 相對電界의 세기 E/N:3.5~120[Td]領域에서는 壓力의 增加에도 實測値와 거의 一致하였으나 E/N:15~80[Td]領域에서는 電界E/N이 增加함에 따라 電子移動速度가 減少하는 現象 즉 負向配(NDC : Negative Differential Conductivity)의 特性이 나타났다. 그리고 E/N:80[Td]이상의 領域에서는 電子移動速度(V_d)가 增加함에 따라 급격히 電氣傳道特性이 向上된다는 結論을 얻을 수

있었다.

2. 縱方向 擴散係數(ND_L)는 Q_m 에 Ramsauer minimum을 가진 가스들의 독특한 特徵을 나타내었으며 E/N [Td]의 增加에 따른 依存性이 크게 作用하고 있음을 豫測할 수 있었다.

3. 電子特性에너지(D_L/μ)는 $E/N:1.5\sim 60$ [Td]領域에서는 실측치와 거의 일치하였으나 $E/N:60\sim 300$ [Td]에서는 勵起와 電離衝突의 反應으로 非彈性衝突 作用이 일어나고 있음을 豫측할 수 있다. 그리고 特性에너지(D_T/μ)에서는 실측치와 $E/N:2\sim 40$ [Td]범위에서 일치하였으나 그 외 領域에서의 다소 차이를 보인 것은 移動度($\mu = v_d/E$)의 산출에 적용한 移動速度가 다르기 때문인 것으로 豫측할 수 있다.

4. $E/N:30, 50$ [Td]에 대한 電子에너지 分布函數는 全衝突斷面績을 사용하여 計算하였고 그 값으로부터 電子群 파라미터를 計算하였다. 그리고 電子勵起나 電離 등의 非彈性衝突과 振動勵起 斷面績의 公明효과 때문에 放電파라미터의 特性에 큰 影響이 나타남을 알 수 있었고 壓力 變化에 따른 電子에너지 分布函數의 差異는 E/N [Td]와 電子의 平均에너지의 값에 따라 큰 影響이 나타남을 確認하였다.

本 研究에서는 高價의 裝備를 使用하여 研究하였던 參考文獻의 結果들을 시뮬레이션을 통하여 거의 같은 結果를 얻을 수 있으므로 경제적인 측면과 시간적인 측면에서 有用하리라 思料된다.

本 研究는 市立仁川專門大學 校內 研究費 支援에 의한 論文임

참 고 문 헌

- [1] Stephen M. Rossnagel, Jerpome J. Cuomo, William D Westwood, Handbook of Plasma Processing Technology, Noyes Publications, 1990.
- [2] 大森義行, 下妻光夫, 田頭博昭, "SiH₄ 가스의 電子衝突斷面績および 스우오-ム 파라메타" 電氣學會研究會資料, ED-86-114, HV-86-34, 1988.
- [3] 菅野卓雄編著, 半導体プラズマプロセス技術, 産業圖書, pp.38-50, 1993.
- [4] 小沼光晴著 "プラズ마と成膜の基礎", 日刊工業新聞社 pp.13-20, 1993.
- [5] Pollock WJ, Momentum Transfer and Vibrational Cross-sections in Non-polar Gases Trans. Faraday. Soc., 64, pp.2919-26, 1988.
- [6] Cottrell T.L, Walker. I. C Electron collision cross sections for the mono-silane molecule Trans, Faraday Soc. 61, pp.1583-1593, 1965.
- [7] C. Jacoboni and P. Lugli, The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation, Springer-Verlag Wien, pp.1-4, 1989.
- [8] 電氣學會技術報告, 氣體放電シミュレーション技法", 第140号, 1974.
- [9] 津田孝夫, 몬テカル로法とシミュレーション, 培風館, 1969.
- [10] Haller I, Importance of chain reactions in the plasma deposition of hydrogenated amorphous silicon J.vac. Sci. Technol. A, pp. 1376-1382, 1983.
- [11] M. Kurachi, Y. Nakamura Electron collision cross sections for the mono-silane molecule, J.phys. D: Appl. phys. 22, pp.107-112, 1987.
- [12] Tossell J.A. MS-X α calculation of the elastic electron scattering cross sections and X-ray absorption spectra of CX₄ and SiX₄ (X=H, F, Cl) J.chem.Phys, pp.813-821, 1984.
- [13] Ohmori Y, Kitamori K, Shimozuma M and Tagashira H, Boltzmann equation analysis of electron swarm behaviour in methane J. Phys. D, pp.437-455, 1986.
- [14] Y. Nakamura. Transport Coefficients of Electrons and Negative Ions SF₆. J. Phys. D, Vol. pp. 1~36, 1981.
- [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] 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.
- [17] W. C. Fon, K. A. Berrington, P. G. Burke, The elastic Scattering of electrons from inert gases: Argon J.Phys. B : At. Mol. Phys. 16, pp.307~321, 1983
- [18] Arati Dasgupta and A. K. Bhatia, Scattering of electrons from Argon atoms Phys. Rev. A. Vol. 32, No. 6, pp.3335~3341, 1985.
- [20] 金相南, "시뮬레이션에 의한 CF₄, CH₄, Ar混合氣體에서 電子에너지분포함수" 대한전기학회논문집, 52P-1-2, pp.9~13, 2003
- [21] 金相南, "SiH₄-Ar혼합기체의 전자분포함수 해석" 대한전기학회논문집, 53P-2-4, pp.65~69, 2004
- [22] 金相南, "MCS-BEq 에 의한 SF₆-Ar혼합기체의 전자이동속도" 대한전기학회논문집, 54P-1-5, pp.29~33, 2005