

MCS에 의한 Helium 기체 중의 전자수송특성 해석

송병두, 하성철, 서상현, 문기석, 유희영*, 김상남*
동국대학교 전기공학과, 대림전문대 전자과*, 인천전문대 전기과*

Analysis of electron transport characteristic in He gas by MCS

Byoung-Doo, Song, Sung-Chul, Ha, Sang-Hyoen, Seo, Ki-Seok, Moon, Hoy-Young, Yoo*, Sang-Nam, Kim*.
Dep. of electrical engineering Dongguk University, Dealim technical college*, Inchon Technical college*

Abstract - Recently the research about electron transport characteristic and energy distribute function in mixture gases within Helium, has been used and developed widely as industrial quality improvement of extinguish characteristic, electrical dielectric strength ability of application of each species high voltage apparatus, gas plasma etching progress of work to use manufacture of semiconductor, thin film molding by CVD, insulation film to use ultra LSI, etc.

This paper analyze electron transport characteristic in the range E/N 1~60(Td), pressure 0.1~6.0(Torr) by MCS.

It is necessary to seek electron drift velocity, diffusion coefficient, Ionization coefficients, characteristic energy, mean energy and electron energy distribution function as electron transport characteristic.

1. 서 론

기체는 전기적으로 많은 중성적인 입자가 무질서한 상태로 운동하고 서로 충돌하는 복잡한 상태에 있기 때문에 원자, 분자와 전자의 충돌에 관한 연속적인 반응에 있어서 약전리 플라즈마의 특성을 이해하는 것은 플라즈마의 상세한 모델을 설정하는데 중요하다. 따라서 이들에 관한 연구는 고속 컴퓨터의 성능향상과 수치적 해석 방법의 정교함으로 인하여 정확하고 신뢰성이 높은 영역 까지 전자군 파라미터의 연구가 진행되고 있다. 특히 He 기체를 포함한 혼합기체 중에서의 전자수송특성과 에너지분포함수에 관한 연구는 전기적 절연내력과 소호 특성의 질적 향상, 각종 고전압기기의 적용가능성 및 반도체 제조용 기체 Plasma etching 공정, CVD (Chemical Vapor Deposition)에 의한 박막형성, 초 LSI용 절연막 등에 공업적으로 폭넓게 이용 발전되고 있다.⁽⁶⁾ 그러므로 이것을 해석하기 위해서는 전자이동속도, 종축확산계수, 횡축확산계수, 종축확산에너지, 횡축 확산에너지, 전리계수, 평균에너지 및 전자에너지 분포함수를 파악하는 것이 필요하다.

본 논문에서는 He가스의 절연내력특성파악을 목적으로 T=300(°K), E/N=1.0~60(Td), P=0.1~6.0(Torr) 범위 내에서 몬테칼로 시뮬레이션을 TOF(Time of Flight) Sampling에 의해서 계산하였다.⁽³⁾⁽⁴⁾

2. 본 론

2.1 MCS와 시뮬레이션 방법

몬테칼로법은 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.⁽¹⁾

몬테칼로 시뮬레이션(MCS)은 Itoh, Musha(1960)⁽⁵⁾ 및 R.W.L. Thomas, W.R.L. Thomas(1969)⁽⁴⁾에 의해서 최초의 연구가 시작되었다. 컴퓨터의 계산능력이 향상됨에 따라 방전공간 내에서 난수를 이용하여 각종 파라미터의 위치적 변동에 의해서 전자의 평균에너지와 전자위치 및 시간의 함수로서 추적하여 해석하는 몬테칼로법은 전자사태에서 나타나는 개개의 전자를 추적하여 방전 파라미터의 동향을 조사하여 이를 전자의 물리량을 가상적으로 샘플링하고 그들 하전입자의 운동을 컴퓨터로 분석하여 전자군의 파라미터의 값을 확률적으로 결정하는 것이다.⁽¹⁾⁽²⁾⁽⁹⁾

전자군 수송특성의 기본계산식은 기체방전 시뮬레이션 기법을 이용하였다. 따라서 최초에 전계분포, 기체수밀도, 초기 전극간 분할(Sampling points : 20), 전자수(수 1000정도), 난수(Random Number : 13), 압력 및 전자 추적시간 등의 초기값을 입력한다. 전자의 비행(Flight)을 4t사이 동안 추적하여 충돌의 유무를 판정한다. 그리고 전자의 이동속도, 충돌의 종류, 충돌 후의 비행방향을 시뮬레이션 한다.

본 시뮬레이션에서는 전계분포에 대응하는 전극간의 분해거리, 위치를 분해한 Sample, 그때 전자가 도달하는 시간(Time), 전자의 종방향 거리(R^*R), 전자의 횡방향 거리(D_{LT}) 및 그 점의 전자에너지 등과 전자궤도에서 전리가 일어난 경우에 2차전자, 난수(Random Number : 13) 등을 양극에 도달할 때까지 반복 추적하여 SPARC WORK STATION(SS-20)을 이용하여 시뮬레이션 하였다.

2.2 전자 충돌 단면적

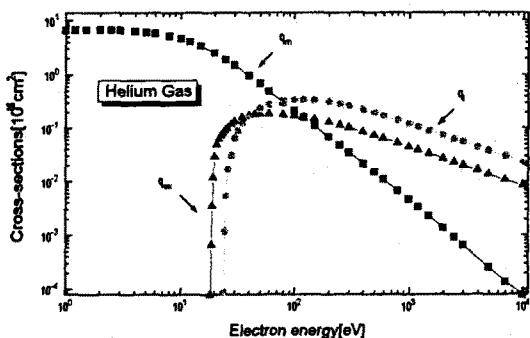


그림 1. He 가스의 충돌단면적

Fig 1. The collision cross section of electrons in He gas

충돌단면적은 전자의 거시적 특성을 이용하는데 기초적 자료로서 중요하다. 가스절연에서 비평형 플라즈마 응용기술에 이르기까지 각각의 경우에 필요한 가스의 종

류, 상태조건(E/N , 가스밀도, 여기조건)을 파악할 수 있으며 전자수송특성에 관한 정보를 알 수 있다⁽²⁾. 절대 가스로는 여러 단면적에서 전리단면적(q_i)과 부착단면적(q_a)이 중요하며 에칭가스로는 여기단면적(q_{ex})과 해리단면적(q_d)이 중요하다.⁽⁷⁾⁽⁸⁾ 또한 기체분자에 대한 전자의 충돌단면적은 전자의 에너지에 의해서 변화한다. 따라서 충돌 입자간의 상호작용으로 기체분자의 여기, 해리, 이온화 등의 반응으로 여기단면적, 해리단면적, 이온화단면적 등으로 나타나며 전충돌단면적은 개개의 반응과정의 합으로 나타낸다. 본 연구에 이용한 He의 전자충돌단면적(그림1)은 운동량 변환단면적(q_m), 전자 여기단면적(q_{ex}), 전리단면적(q_i)으로 구성되어 있다.

2.3 결과 및 고찰

2.3.1 전자 이동 속도

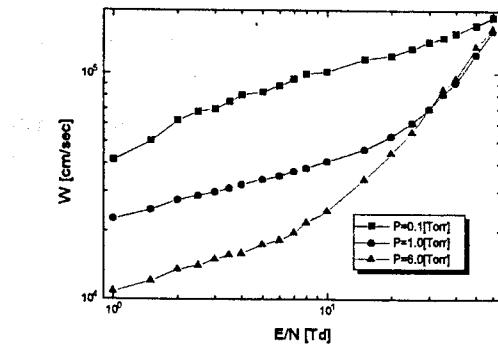


그림 2. He 가스의 전자이동속도

Fig 2. The drift velocity of electrons in He gas

[그림2]은 전자이동속도 (W)는 $E/N = 1\sim60$ [Td] 범위에서 압력 $P=0.1, 1.0, 6.0$ [Torr] 세 가지에 대하여 몬테칼로 시뮬레이션법으로 계산하고 그 결과를 서로 비교한 것이다. 전자에너지 분포함수와 탄성, 비탄성 충돌단면적을 이용하여 계산된 전자이동속도는 E/N [Td]의 증가에 대하여 거의 선형적으로 증가하고 높은 압력에서는 그 값이 서로 일치하는 것을 보여준다. 또한 전계로부터 에너지를 얻은 전자가 미소거리를 이동하는 동안에 충돌 전리화율은 평균 자유행정에 의해 나타나며 이것은 압력에 반비례하므로 낮은 기압에서 전자에너지 는 크므로 전자이동속도는 증가하는 것으로 생각된다.

2.3.2 종·횡축 확산계수

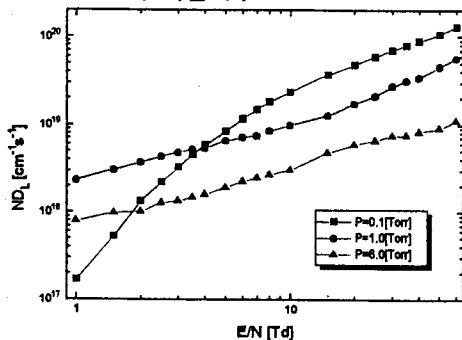


그림 3. He 가스의 종방향 확산계수

Fig 3. The longitudinal diffusion coefficients in He gas

[그림3]의 종축확산계수는 기체분자수밀도(N)와의 곱 ND_L 을 E/N [Td]의 함수로 나타내었고, 세 가지 압력에 대하여 서로 비교하였다.

여기서 ND_L 은 E/N [Td]의 증가에 따른 의존성이 크

게 작용하고 있음을 알 수 있으며 $P=0.1$ [Torr]일 때 낮은 전계에서 그 값이 갑자기 낮아지는 것을 보여 준다.

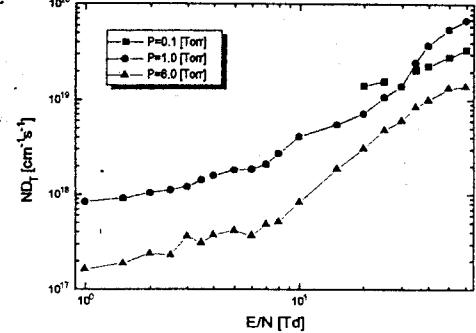


그림 4. He 가스의 횡방향 확산계수

Fig 4. The transverse diffusion coefficients in He gas

[그림4]의 횡축확산계수는 기체분자수 밀도와의 곱 ND_T 를 마찬가지 방법으로 서로 비교하여 나타내었다.

여기서도 E/N [Td]에 대하여 같은 작용을 나타냈으나 공교롭게도 $P=0.1$ [Torr]에서는 높은 전계에서만 데이터를 얻을 수 있었다.

2.3.3 종·횡방향 특성 에너지

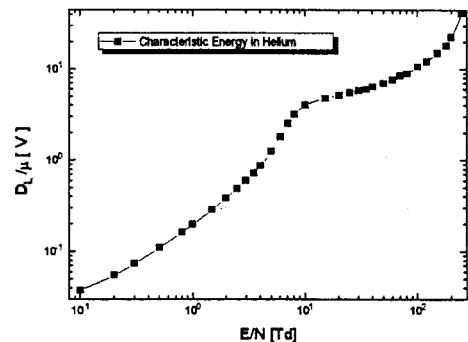


그림 5. He 가스중의 종방향 특성에너지

Fig 5. The longitudinal characteristic energy in He gas

[그림5]은 He 가스중의 종방향 확산계수와 이동도의 비 즉, 종방향 특성에너지(D_L/μ)를 $E/N = 1.0\sim60$ [Td] 변화에 따라 나타낸 것이다. 여기서 $\mu = W/E$ 로서 이동도를 나타낸다. 그림에서 나타난 바와 같이 E/N [Td] 0.1에서 ~10까지 증가하다 이후 증가세가 둔화되었으나 100이후로 다시 증가하는 추이를 보여주고 있다.

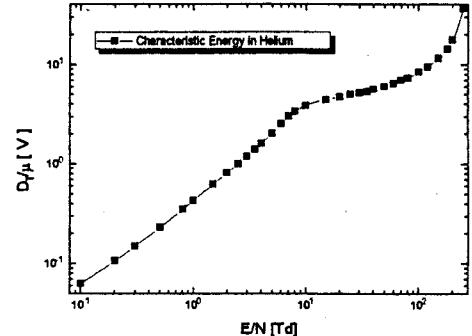


그림 6. He 가스중의 횡방향 특성에너지

Fig 6. The transverse characteristic energy in He gas

[그림6]은 횡방향 확산계수와 이동도의 비를 나타내

는 횡방향 특성에너지를 위와 같은 방법으로 나타낸 것이다. 여기서도 $E/N(Td)$ 0.1에서 ~10까지 증가하다 이후 증가세가 둔화되었으나 100이후로 다시 급격히 증가하는 추이를 보여주고 있다.

2.3.4 전리계수

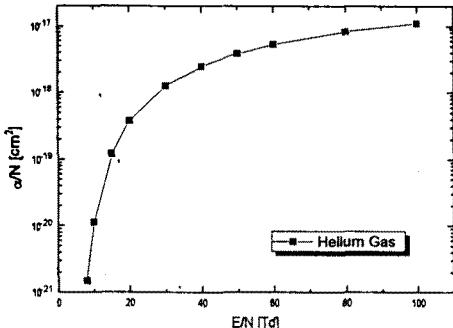


그림 7. He 가스의 전리계수

Fig 7. Ionization coefficients in He gas

[그림7]에 나타난 바와 같이 E/N 값이 적을 때는 α/N 이 급속히 증가하고 E/N 값이 클 때에는 α/N 이 서서히 증가한다. 이와같은 현상은 전자의 에너지가 증가하면 충돌할 때에 상호작용시간이 너무 짧기 때문에 전리하기가 어렵기 때문이다. 기체방전현상 중에서 가장 중요한 전리과정은 전자충돌에 의한 것이므로 전자는 중성분자와의 탄성충돌에 의해 자신의 운동에너지지를 잃어버리므로 전계로 인하여 전리에너지로 가속되어 전리나 여기과정의 역할을 한다. 본 연구에서는 $E/N=8$ [Td] 이하에서 전리가 발생하지 않았다.

2.3.5 평균에너지

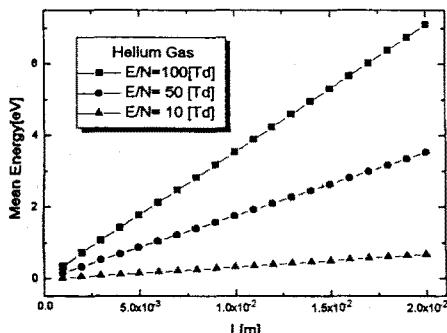


그림 8. He 가스중에서 전자의 평균에너지

Fig 8. Mean energy of electrons in He gas

전자의 평균에너지는 전극간 거리와 시간의 합수로 계산한 전자의 에너지 분포함수. 전자이동속도 등에 관계되는 물리량으로 전극면에서의 전자운동의 증가는 음극의 에너지가 양극으로 이동하고 양극에서는 반사나 음극에서 방출된 2차전자가 모두 흡수된다. 그리고 전자의 평균에너지 ($\langle \epsilon \rangle$)는 전극간 거리와 $E/N(Td)$ 의 변화에 따른 몬테카를로 시뮬레이션으로 [그림8]에서 그 값을 나타내었다.

2.3.6 에너지 분포함수

[그림9]는 He기체에서 탄성 및 비탄성산란을 고려하여 $E/N=10, 30, 60$ [Td]에서 전자에너지 분포함수 $F(\epsilon)$ 를 몬테카를로 시뮬레이션법으로 나타낸 것이다. 전계가 인가될 때 기체중을 이동하는 전자군의 에너지분포

함수는 전자의 각 에너지에 대한 확률밀도와 전자와 분자 사이의 각종 충돌단면적과 방전현상으로 나타나는 전자수송특성에 직접적으로 관련되는 물리량이다. $F(\epsilon)$ 의 값은 초기에너지에서는 높다가 그 이상의 에너지 영역에서는 감소하는 경향이 나타났다. 이것은 전자수와 에너지가 증가함에 따라서 $F(\epsilon)$ 는 38[eV] 이상에서는 일치되고 있다.

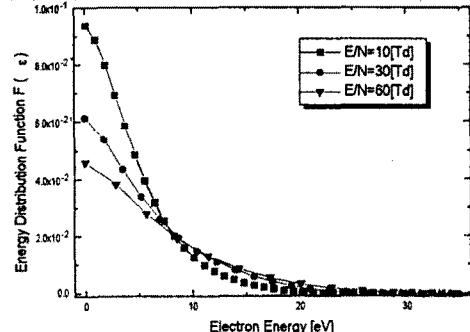


그림 9. He 가스중에서의 전자에너지 분포함수

Fig 9. Electron energy distribution function of electrons in He gas

3. 결 론

He 가스 전자충돌단면적을 이용하여 $E/N=1\sim 60$ [Td] 범위에서 전자수송특성을 몬테카를로 시뮬레이션을 이용하여 해석한 결과는 다음과 같다.

1. He 가스의 이동속도는 낮은 압력에서 증가하므로 전자의 이동속도가 압력에 반비례함을 입증하는 것이다.
2. He 가스에서는 부착계수를 구할 수 없었는데, 이는 최외각전자가 모두 안정된 준위에 있는 비활성기체에 속하기 때문으로 생각된다.
3. He 가스의 종·횡방향 특성에너지는 $E/N=10$ [Td]에서 잠시 구배가 낮아지는데 이는 전자충돌에 의한 전리과정에 의해 전자가 중성분자와의 탄성충돌에 의해 자신의 운동에너지를 잃어버리기 때문이다.

【참 고 문 헌】

- [1] 電氣學會 技術報告, “기체방전 シミュレーション 技法”, 第140号, 1974.
- [2] “モンテカルロ法と シミュレーション”, 培風館, 1989.
- [3] L. G. H. Huxley, R. W. Crompton, “The diffusion and drift of electrons in gases”, John, Wiley and sons.
- [4] R. W. L. Thomas and W. R. L. Thomas, “Monte Carlo simulation of electrical discharges in gases”, J.Phys. B (Atom molec. phys.), Ser. 2, Vol. 2, 1969.
- [5] H. Itoh and T. Musha, “Monte Carlo Calculations of Motions in Helium”, J. Phys. Soc. Japan, Vol. 15, No. 9, pp1675-1680, 1960.
- [6] 菅野卓雄, “半導體 プラズマ プロセス技術”, 産業図書, pp. 38~50, 1993.
- [7] Stephen M. Rossnagel, J. Cuomo, William D. Westwood, “Handbook of Plasma Processing Technology”, Noyes Publications, 1990.
- [8] Brian Chapman, “Glow Discharge Processes”, John Wiley & Sons, 1980.
- [9] 森 正武, “Fortran 77 數値計算 プログラミング” 岩波書店, pp. 41~44, 1995.