

## SiH<sub>4</sub> 플라즈마중의 전자수송특성 해석

이형윤\* 하성철 김대연  
동국대학교

### The Analysis of Electron Transport Characteristics in SiH<sub>4</sub> Plasma

Hyoung-Yoon Lee\*\* Sung-Chul Ha Dae-Yeon Kim  
Dongguk Univ.

**Abstract** - In this paper, the electron transport characteristics in SiH<sub>4</sub> 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 SiH<sub>4</sub> 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. 서론

최근에 각종 기체플라즈마를 사용한 반도체제조 프로세스 기술이 많이 사용되고 있다. Plasma CVD 기술에서는 SiH<sub>4</sub>, SF<sub>6</sub>, CF<sub>4</sub>, SiH<sub>4</sub>+Ar, CF<sub>4</sub>+N<sub>2</sub> 같은 분자들이 자주 사용되며<sup>[1]</sup> 그 중에서도 SiH<sub>4</sub>(monosilane) 가스는 플라즈마 CVD (Chemical Vapor Deposition) 에 의한 Silicon 박막성형, 액정구동용 박막트랜지스터, 초LSI용 절연막, 반도체의 에칭공정 및 기능성 박막의 생성등 공업적으로 이용되고 있으며 그리고 이것은 라디오파(Radio Wave) 및 마이크로파(Micro Wave)전계로 여기시켜 전자와 SiH<sub>4</sub> 분자와의 충돌로 SiH<sub>4</sub> 분자의 해리반응을 거쳐 수소화 비정질실리콘(a-SiH)을 제조할 때 원료가스로 이용된다.<sup>[2,3,4]</sup> 그러므로 폭넓은 분야에 활용되는 SiH<sub>4</sub>가스의 전자군의 성질을 규명하는 것은 매우 중요하다고 할 수 있다. 전자군 파라미터 특성으로는 전자이동속도, 특성에너지, 종방향확산계수, 횡방향확산계수, 전리계수, 전자평균에너지, 전자에너지 분포함수 등이 있다. 더 나은 프로세싱을 위해 플라즈마를 이해하고 디자인하기 위해 이러한 분자들에 대한 전자 충돌단면적의 정확한 지식이 필요하게 되었다. 원자, 분자와 전자의 충돌에 관한 연속적인 반응에 있어서 약 전리 플라즈마의 특성을 이해하는 것은 플라즈마의 상세한 모델을 설정하는데 중요하다. 따라서 이들에 관한 연구는 고속컴퓨터의 성능향상과 수치적 해석방법의 정교함으로 인하여 혁신적으로 전자군파라미터 연구의 정확성과 신뢰성이 높은 영역까지 향상되고 있다. 본 연구에서는 전자의 비평형상태에서 SiH<sub>4</sub>가스의 충돌단면적( $q_m, q_v, q_a, q_i, q_e$  등)을 Haller, Tossell 등이 결정한 값을 이용하여 E/N : 0.5~300(Td) [E : 전계, N : 기체분자수밀도, 1Td =  $1 \times 10^{-17}$  V · cm<sup>2</sup>, N :  $3.5353 \times 10^{16}$  cm<sup>-3</sup> 0°C 1 Torr에 해당]와 압력 P<sub>0</sub> : 0.5, 1, 2.5(Torr) 범위에서 비등방성 산란을 고려하여

계산하고 그 결과를 Pollock<sup>[5]</sup>, Ohmori, Cottell and Walker<sup>[6]</sup>의 실험값과 비교하여 전자수송특성을 고찰하였다. 그리고 전자충돌단면적의 타당성에 대하여 검토하고 평균에너지에 따른 전자에너지분포함수를 볼츠만방정식과 몬테칼로 시뮬레이션으로 계산한 전자수송특성을 해석하였다.

#### 2. 해석방법

전자군을 구성하는 전체의 전자를 해석하기 위해서는 전자를 수천회(5000회) 추적하는 것으로 설정하였다. 그리고 기체의 종류, 압력, 밀도, 각종 충돌단면적, 전계, 전자수로 기체분자와의 충돌을 반복하면서 전자상태를 형성하고 그 전자가 양극에 도달한다. 한편 전리 및 부착작용에 의해서 생긴 전자는 그 시점에 대한 에너지, 위치, 및 속도 등의 값을 초기 전극간 분할수(Sampling points : 20등분)와, 초기난수(Initial random number : 13)을 이용하여  $\Delta \ell = \lambda / 10$  ( $\lambda$ : 평균자유행정)<sup>[7,8,9]</sup> 법으로 전자군파라미터를 MCS법으로 계산한다. 그리고 볼츠만법을 Philip . E . Luft Backward prolongation program<sup>[10]</sup>에 의해 전자에너지 분포함수를  $\int_0^\infty \epsilon^{1/2} f(\epsilon) d\epsilon = 1$ 에 의해 구한 f(ε)값을 이용하여 각종 전자군 수송특성을 Sparc Workstation SS-20 반복추적으로 계산하였다. 볼츠만 방정식은 MCS와는 다르게 개개의 전자를 추적하지 않고 처음부터 다수의 입자를 포함하는 전자류를 취급하기 위하여 충돌의 확률적 성질을 기초로 하여, 전자군의 연속적인 예측이 가능하고 계산시간이 비교적 짧아 각종 전자군 파라미터를 산출하는데 일반적으로 사용되어 왔다.

#### 3. 전자충돌단면적

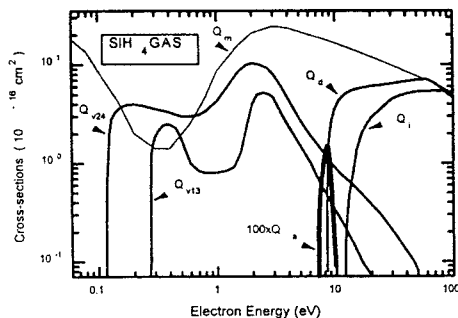


그림 1. SiH<sub>4</sub>가스의 전자충돌단면적  
Fig. 1. Collision cross section of electrons in SiH<sub>4</sub> gas

본 연구에 이용한  $\text{SiH}_4$ 의 전자충돌단면적은 Haller<sup>(10)</sup> Tossell<sup>(12)</sup>의 값을 이용하여 계산하였고 그림 1에 나타내었다.

전자의 거시적 특성을 이해하는데 충돌단면적은 기초적 자료로서 이용된다. 또한 기체분자에 대한 전자의 충돌단면적은 전자의 에너지에 의해서 변화한다. 따라서 충돌입자간의 상호작용으로 기체분자의 여기, 해리, 이온화 등의 반응으로 여기단면적, 해리단면적, 이온화단면적 등으로 나타내며 전충돌단면적은 개개의 반응과정의 합으로 나타낸다.

#### 4. 해석결과 및 고찰

##### 4.1 전자이동속도

전자와  $\text{SiH}_4$  분자와의 저 에너지 영역에 있어서의 비탄성충돌이 그림2에 나타난 전자이동속도에 매우 큰 영향을 준다고 여겨진다.<sup>(11)</sup>

그림1에서  $\text{SiH}_4$  가스의 운동량변환단면적( $Q_m$ )은 0.3~2.5(eV)부근에 넓은 Ramsauer minimum과 여기에 커다란 진동 여기단면적이 존재하므로 진동여기충돌에 의해서 낮은 에너지대의 전자가 많기 때문에 전자 에너지의 커다란 순환이 발생하고 완화시간의 감소로 각각의 압력 P에 따른 E/N : 15~80(Td) 영역에서 전체 E/N이 증가함에 따라 전자이동속도가 감소하는 상측 부구배(NDC : Negative Differential Conductivity)전도도의 특성을 나타내었다.

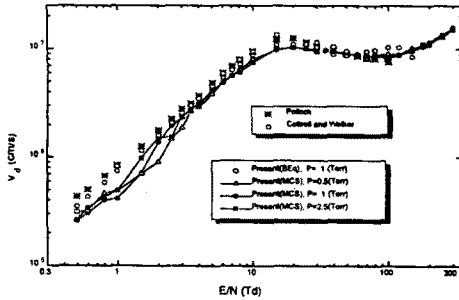


그림 2.  $\text{SiH}_4$  가스에서 전자이동속도  
Fig. 2. Drift velocity of electrons in  $\text{SiH}_4$  gas

##### 4.2 전리계수

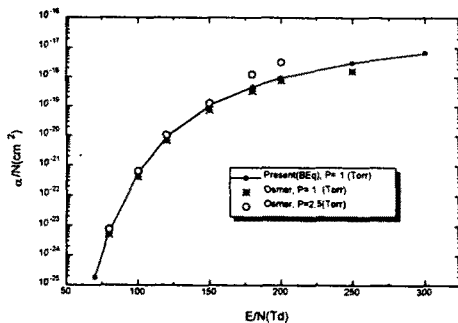


그림 3.  $\text{SiH}_4$  가스에서 전리계수  
Fig. 3. Ionization coefficients in  $\text{SiH}_4$  gas

본 연구에서는 60(Td)이하에서는 전리가 일어나지 않았다. 그리고 압력이 1(Torr) 일 때는 계산값과 실험값이 거의 일치하였으나 압력이 높아질 때는 E/N : 150(Td)이상에서 급격히 전리계수의 압력존성이 나타남을 볼 수 있다. 이것은 기체압력의 증가에 수반되는 진동여기상태에 있는  $\text{SiH}_4$  분자의 밀도가 증가되는 것으로 판명된다.<sup>(7)</sup>

##### 4.3 종·횡방향확산계수

종방향확산계수( $ND_L$ )에 있어서 E/N이 증가함에 따라 수반하여 감소하는 영역이 있다. 그림4에서 알 수 있듯이 E/N : 15~80(Td)에서 나타나는 이 영역은 이동속도가 Negative Differential Conductivity를 보이는 E/N의 영역과 거의 일치한다. 압력변화에 따른 데이터도 그림4에서 알 수 있듯이 E/N : 15~100(Td) 영역에서 NDC 특성이 나타남을 알 수 있다.

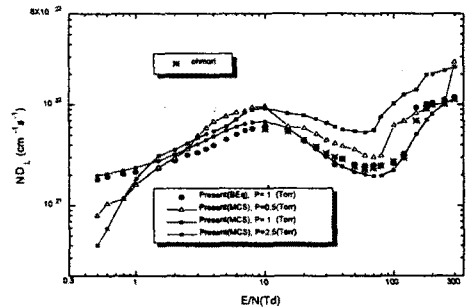


그림 4.  $\text{SiH}_4$  가스에서 종방향확산계수  
Fig. 4. Longitudinal diffusion coefficients in  $\text{SiH}_4$  gas

횡방향 확산계수( $ND_T$ )는 그림5에서 MCS 계산값과 Ohmori의 실험값을 나타내었다.  $ND_L$ 과 마찬가지로  $ND_T$ 에서도 E/N에 따른  $ND_T$ 의 변화가 E/N중간에서 가라앉는 특징을 보인다. 비슷한 특징이 Ar에서도 발견되며 이러한 특징은  $Q_m$ 에 Ramsauer minimum을 가지고 있는 가스들의 독특한 특징으로 여겨진다.

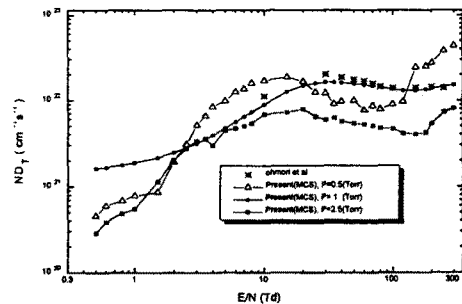


그림 5.  $\text{SiH}_4$  가스에서 횡방향확산계수  
Fig. 5. Transverse diffusion coefficients in  $\text{SiH}_4$  gas

##### 4.4 특성에너지

그림6에 나타난 종방향 특성에너지( $D_L/\mu$ )는 E/N : 1.5~60(Td) 영역에서는 Pollock<sup>(5)</sup>과 Gar scadden et al<sup>(2)</sup>의 실험값과 거의 일치하였고 E/N : 60~

300(Td)에서는  $D_L/\mu$  값이 증가하였다. 이것은 여 기충돌에 의한 drift속도의 상승과 전리충돌에 의한 전 자수 보존상태의 영향을 받는 것으로 생각된다.

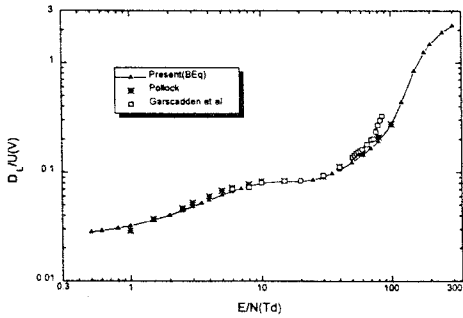


그림 6. SiH<sub>4</sub>가스에서 종방향 특성에너지  
Fig. 6. Longitudinal characteristic energy in SiH<sub>4</sub> gas

횡방향 특성에너지( $D_T/\mu$ )는 그림7에서 전계에 수직 한 방향으로 확산하는 비율이 E/N : 2~40(Td)범위에서 는 Pollock과 Ohmori<sup>[13]</sup>의 실험값과 거의 일치하나 그 외 영역에서는 BEq법에 의한 값은 다른 실험값과 다소 차이를 나타낸 것은 이동도( $\mu = V_d/E$ )의 산출에 적용한 이동속도가 다르므로 E/N의 증가에 따라서 이동도는 감소하고 확산계수는 증가한 것으로 생각된다.

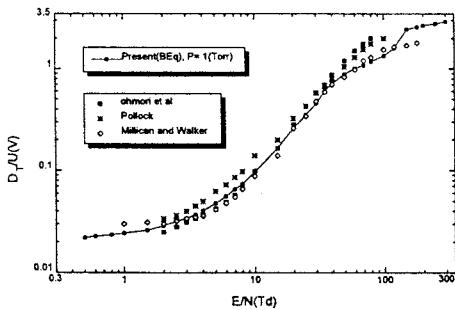


그림 7. SiH<sub>4</sub>가스에서 횡방향 특성에너지  
Fig. 7. Transverse characteristic energy in SiH<sub>4</sub> gas

#### 4.5 평균에너지

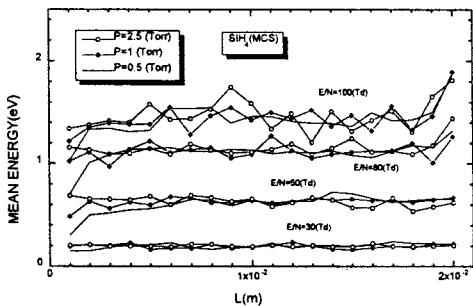


그림 8. SiH<sub>4</sub>가스에서 전자의 평균에너지  
Fig. 8. Mean energy of electron in SiH<sub>4</sub> gas

전자의 평균에너지( $\bar{\epsilon}$ )는 전극간거리 및 시간의 함수로 써 계산되는 전자에너지분포, 전자이동속도 등에 관계되 는 물리량이다. 전극면에서의 전자운동의 증가는 음극의 에너지가 양극으로 이동하고 양극에서는 반사나 음극으 로 방출된 2차전자가 모두 흡수된다. 또한 전극간거리 (m) 와 E/N : 30, 50, 80, 100(Td)의 변화에 따른 몬테칼로 시뮬레이션으로 압력 P : 0.5, 1, 2.5 (Torr)에 따라 추적한 값은 그림8에 나타냈으며 샘플링 의 차에 의하여 음극과 양극 가까운 영역의 전자의 평균 에너지는 영점으로부터 비탄성충돌이 일어날 에너지까지 는 직선적으로 상승하여 비평형의 상태로 나타나고 그 의 영역에서는 거의 평형상태의 에너지값을 나타내었다.

#### 4.6 에너지 분포함수

전자에너지분포  $F(\epsilon)$ 는 그림9와 10에서 탄성 및 비 탄성충돌을 고려하여 E/N=30, 50(Td) 및 압력 P : 0.5, 1, 2.5(Torr)에 대하여 나타내었다. 그림9, 10에 서 나타나듯이 MCS로 추적하여 나타난 전자에너지분포 는 비평형상태로 이 때의 평균에너지 값이 각각  $\bar{\epsilon}$  : 0.21(eV),  $\bar{\epsilon}$  : 0.64(eV), Sample(2, 16), 거리 (0.2, 1.6cm)로 BE<sup>(8)</sup>법과 SST<sup>(8)</sup>법의 계산법과 전반 적으로 차이를 나타내었다. 또한 여기로 인하여 전자의 에너지를 잃어버리는 것이 크면 비평형영역도 크게 나타 난 것으로 생각된다.

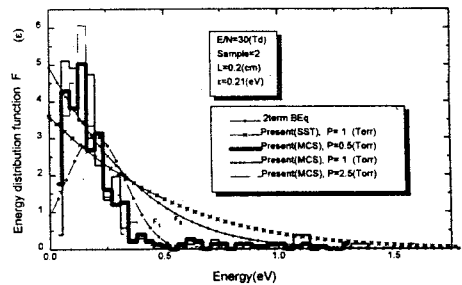


그림 9. SiH<sub>4</sub>가스에서 전자에너지 분포함수  
Fig. 9. Energy distribution function of electrons in SiH<sub>4</sub> gas

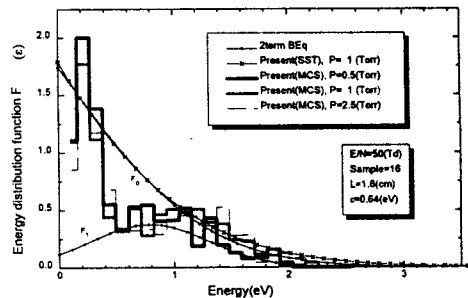


그림 10. SiH<sub>4</sub>가스에서 전자에너지 분포함수  
Fig. 10. Energy distribution function of electrons in SiH<sub>4</sub> gas

#### 5. 결 론

본 논문에서는 SiH<sub>4</sub> 가스의 전자충돌단면적을 이용하

여  $E/N:0.5\sim 300(\text{Td})$ , 압력  $P:0.5, 1, 2.5(\text{Torr})$  범위에서 방전파라미터의 특성을 비평형 상태에서 몬테칼로 시뮬레이션과 볼츠만방정식으로 해석한 결과 다음과 같은 결론을 얻었다.

1.  $\text{SiH}_4$  플라즈마의 전자이동속도( $V_d$ )의 전체적인 변화는 상대전계의 세기  $E/N:3.5\sim 120(\text{Td})$  영역에서는 압력의 증가에도 실측치와 거의 일치하였으나  $E/N:15\sim 80(\text{Td})$  영역에서는 전계  $E/N$ 이 증가함에 따라 전자이동속도가 감소하는 현상 즉 부구배(NDC : Negative Differential Conductivity)의 특성이 나타났다. 그리고  $E/N:80(\text{Td})$  이상의 영역에서는 전자이동속도( $V_d$ )가 증가함에 따라 급격히 전기전도특성이 향상된다는 결론을 얻을 수 있었다.

2. 종방향 확산계수( $ND_L$ )는  $Q_m$ 에 Ramsauer minimum을 가진 가스들의 독특한 특징을 나타내었으며  $E/N(\text{Td})$ 의 증가에 따른 의존성이 크게 작용하고 있음을 예측할 수 있었다.

3. 전자특성에너지( $D_L/\mu$ )는  $E/N:1.5\sim 60(\text{Td})$  영역에서는 실측치와 거의 일치하였으나  $E/N:60\sim 300(\text{Td})$  에서는 여기와 전리충들의 반응으로 비탄성충돌 작용이 일어나고 있음을 예측할 수 있다. 그리고 특성에너지( $D_T/\mu$ )에서는 실측치와  $E/N:2\sim 40(\text{Td})$  범위에서 일치하였으나 그 외 영역에서의 다소 차이를 보인 것은 이동도( $\mu = V_d/E$ )의 산출에 적용한 이동속도가 다르기 때문인 것으로 예측할 수 있다.

4.  $E/N:30, 50(\text{Td})$ 에 대한 전자에너지 분포함수는 전충돌단면적을 사용하여 계산하였고 그 값으로부터 전자군 파라미터를 계산하였다. 그리고 전자여기나 전리 등의 비탄성충돌과 진동여기 단면적의 공명효과 때문에 방전파라미터의 특성에 큰 영향이 나타남을 알 수 있었고 압력변화에 따른 전자에너지 분포함수의 차이는  $E/N(\text{Td})$ 와 전자의 평균에너지의 값에 따라 큰 영향이 나타남을 확인하였다.

#### [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, "SiH<sub>4</sub> 가스의電子衝突斷面積および 스우오-ム 베라-메-타" 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마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 monosilane 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, "モンテカルロ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. 1376-82, 1983.
11. M. Kurachi, Y. Nakamura "Electron collision cross sections for the monosilane

molecule". J.phys.D: Appl. phys.22, pp.107-112, 1987.

12. 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.

13. Ohmori Y, Kitamori K, Shimozuma M and Tagashira H, "Boltzmann equation analysis of electron swarm behaviour in methane" J. Phys. D, pp.437-55, 1986.