

SiH₄ + Ar가스의 전자평균에너지 및 전자에너지분포함수 해석

이형윤* 박명진 하성철
 동국대학교 전기공학과

The Analysis of the Electron Mean Energy and Electron Energy Distribution Function in SiH₄ + Ar gas

Hyoung-Yoon Lee*, Myoung-Jin Park, Sung-Chul Ha
 Dongguk Univ. Electrical Engineering

Abstract - In SiH₄+Ar mixture gas contains 0.5% and 5% monosilane, this paper calculated electron swarm parameters in E/N has ratio 1~300(Td) and P : 1 (Torr) by MCS and Beq method. Electron swarm parameters showed a irregularity change in Ar mixed a little monosilane. It tends that the electron drift velocity is inversely proportional to E/N. It also represented characteristics that the transverse diffusion coefficient depends on E/N.

으로 사용하면 간단하게 처리 할 수 있고 직관적으로 이해 할 수 있는 장점이 있다. 본 연구에서는 방전공간내의 전자수송계수의 성질을 해석하기 위해 의사난수를 이용하여 각종 전자수송계수를 전자의 위치 및 시간의 함수로서 추적하였다. 계산의 방법은 전자사태에서 나타나는 개개의 전자를 추적하여 방전의 파라미터의 동향을 조사하는 방법과 전자의 물리량을 가상적으로 샘플링하고 하전입자의 운동을 분석하여 전자수송계수의 값을 확률적으로 결정하는 방법이 적용되었다. 전계가 존재하는 공간의 방전 메카니즘에 있어서 전자는 전계에 의해서 높은 에너지를 갖게 되어 전자에너지가 불평형상태가 되므로 전자에너지분포를 추정하기는 매우 어렵다. 따라서 이러한 불평형상태에서 전자에너지분포를 산출할 수 있는 몬테칼로 시뮬레이션은 매우 유용하다.^[4]

1. 서 론

Monosilane(SiH₄)가스는 플라즈마 CVD에 의한 Silicon박막퇴적등에 널리 이용되고 있다.^[1] 이 SiH₄을 이용하여 효율적인 플라즈마 프로세싱을 행하기 위해서는 컴퓨터 시뮬레이션이 효율적이고, 이 때문에 SiH₄전자충돌단면적을 알아야 한다.^[2, 3]

본 연구에서는 전자의 비평형상태에서 0.5(%) , 5(%)의SiH₄가스와 Ar과의 혼합가스를 이용하여 E/N : 1~300(Td) (E:전계, N:기체분자수 밀도, 1Td=1 × 10⁻¹⁷V · cm², N:3.5353 × 10¹⁶cm⁻³ 0°C 1 Torr에 해당)범위에서 비등방성 산란을 고려하여 계산하여 전자수송특성을 고찰하였다. 전자수송계수의 성질을 규명하는 것은 매우 중요하다고 할 수 있다. 전자수송계수는 전자이동속도, 특성에너지, 종방향확산계수, 횡방향확산계수, 전리계수, 전자평균에너지, 전자에너지 분포함수 등이 있다. 전리계수는 전기절연기기의 설계에 불가결한 특성이므로 가스의 성질을 판단하는 중요한 특성으로 널리 사용되어진다. 또한 전자에너지 분포함수는 비평형 RF(Radio Frequency)플라즈마에서 전자온도와 이온화 분자가 현저한 온도차가 있으며 박막 추적 및 에칭에 필요한 Radical 분자이온 등 1차적 전자 충돌에 의하여 생성되는 특성으로서 정확히 구할 필요가 있다.전자의 평균에너지는 전자분포함수의 해석을 더욱 명확히 하는 중요한 데이터로 활용된다. 그리고 전자충돌단면적의 타당성에 대하여 검토하고 평균에너지에 따른 전자에너지 분포함수를 볼츠만방정식의 Backward Prolongation 법과 몬테칼로 시뮬레이션으로 계산한 전자군파라미터를 해석하였다.^[4] 이러한 계산과 검토에 의해 산출된 전자수송계수는 전자와 원자, 분자들 사이의 상호작용에 의한 저 에너지 영역의 전자산란의 중요한 자료로서 활용이 기대되어 진다.

2.2 볼츠만 법

볼츠만 수송방정식은 열평형 상태가 아닌 경우, 전자가 운동 중 충돌에 의한 임의의 속도와 임의의 위치에 존재하는 전자의 수가 시간에 따라 어떻게 변화하는가를 결정하는 것이다. 볼츠만에서는 몬테칼로 시뮬레이션과 달리 개개의 전자를 추적하지 않고 처음부터 다수의 입자를 포함하는 전자류를 취급하기 위하여 충돌의 확률적 성질을 기초로 하여 전자군의 연속적인 통찰이 가능하고 따라서 전자군의 운동과정을 명확히 규명할 수 있으며 이들의 여러 가지 파라미터를 정량적으로 해석하는 경우 비교적 짧은 시간으로 전산처리 하여 구하여 진다. 기체 중의 전자수송현상을 이해하기 위해서는 전자의 분포함수를 알아야할 필요가 있다.

3. 전자충돌단면적

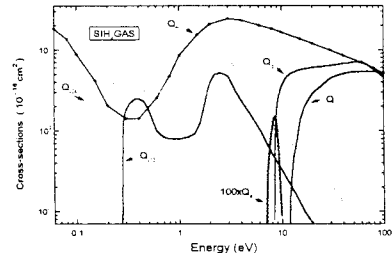


그림 1. SiH₄가스의 전자충돌단면적
 Fig. 1. Collision cross section of electrons in SiH₄ gas

2. 해석방법

2.1 몬테칼로 시뮬레이션

몬테칼로 시뮬레이션은 우연현상의 경과를 난수를 사용하여 수치적, 모형적으로 실현시켜 관측함으로써 문제의 근사해를 얻는 방법이다. 원자에서 중성자의 차폐 효과(shielding effect), 표본분포 등의 문제를 이 방법

SiH₄ 분자구조는 복잡하므로 양자역학에 의한 단면적 계산은 어렵고, 전자swarm실험과 전자beam실험 결과로부터 볼츠만방정식해석에 따라 단면적이 구하여 진다.

4. 해석결과 및 고찰

4.1 전자이동속도

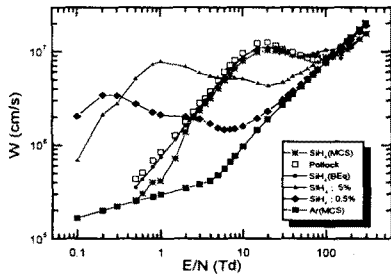


그림 2. SiH₄+Ar 혼합가스에서 전자이동속도
Fig. 2. Drift velocity of electrons in SiH₄+Ar gas

0.5(%)와 5(%)의 SiH₄+Ar 혼합가스의 이동속도를 그림2에 나타내었다. 순수SiH₄가스와 마찬가지로 0.2~20(Td) 범위에서 전계(E/N)가 증가함에 따라 전자이동속도가 감소하는 현상 즉 부구배(NDC : Negative Differential Conductivity)의 특성을 나타내었다. 이는 Ar의 충돌단면적(Q_m)이 0.2~15(eV) 부근에 넓은 Ramsauer minimum을 가지고 있으며 여기에서는 기체원자·분자와 충돌하는 빈도도 적은 것이므로 전계방향의 평균속도값은 크게 된다.⁽⁸⁾

4.2 전리계수

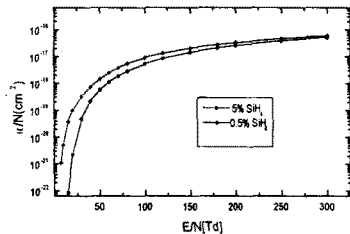


그림 3. SiH₄+Ar 혼합가스에서 전리계수
Fig. 3. Ionization coefficients in SiH₄+Ar gas

기체 방전 현상중에서 중요한 전리과정은 전자충돌에 의한 것이므로 전자는 중성분자와의 탄성충돌에 의해 자신의 운동에너지를 잃어버리므로 전계로 인하여 전리에너지로 가속되어 전리나 여기과정의 역할을 한다. 그림3에 나타난 전리계수에서 낮은 E/N(Td) 영역에서는 급격히 증가하였으나 높은 E/N(Td) 영역에서는 거의 일정한 경향을 나타내는데 이러한 현상은 전자의 에너지가 증가하면 충돌할 때에 상호작용한 시간이 너무 짧기 때문에 전리하기가 어렵기 때문이다. E/N : 20(Td) 이상에서 급격히 전계(Td)의존성이 나타남을 볼 수 있다. 이것은 E/N(Td) 증가에 수반되는 진동여기상태에 있는 SiH₄ 분자의 밀도가 증가되는 것으로 판명된다.

4.3 종·횡방향 확산계수

그림4.5에 나타난 종방향과 횡방향확산계수는 가스분자수 밀도(N)와의 곱ND_L을 E/N(Td)의 함수로 나타내었다. 그림4에 알 수 있듯이 E/N:3~10(Td)에서 E/N이 증가함에 따라 수반하여 감소하는 영역이 나타나는데 이는 E/N이 증가함에 따라 전자는 큰 평균운동 에너지를 가진 것이 된다. 종방향확산계수와 마찬가지로

횡방향확산계수에서도 E/N(Td)이 증가함에 따라 감소하는 특징을 보이는데 이는 Ar에서도 발견되며 이러한 특징은 Q_m에 Ramsauer minimum을 가지는 가스들의 독특한 특징으로 여겨진다.

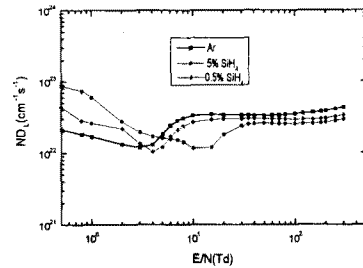


그림 4. SiH₄+Ar 가스에서 종방향 확산계수
Fig. 4. Longitudinal diffusion coefficients in SiH₄+Ar gas

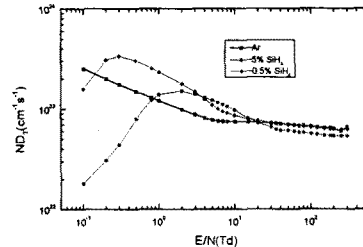


그림 5. SiH₄+Ar 가스에서 횡방향확산계수
Fig. 5. Transverse diffusion coefficients in SiH₄+Ar gas

4.4 종·횡방향 특성에너지

본 논문에서는 전계와 이온의 밀도볼포가 동시에 존재하고 또 충돌상태를 생각하여 이동도와 확산계수와와의 관계 즉 특성에너지를 그림 6,7과 같이 E/N: 1~300(Td) 변화에 따라 볼츠만방정식의 2항근사식을 이용한 모의 실험값을 나타낸 것이다. 여기서 $\mu = W/E$ 로서 이동도를 나타낸다. 종방향특성에너지의 E/N:4(Td) 이상에서 급격히 증가하는데 이것은 여기충돌에 의한 Drift속도의 상승과 전리충돌에 의한 전자수 보존상태의 영향을 받는 것으로 생각된다.

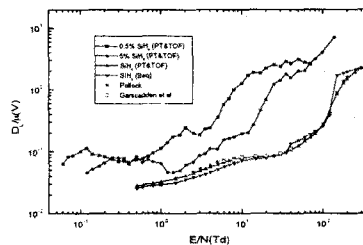


그림 6. SiH₄+Ar 가스에서 종방향 특성에너지
Fig. 6. Longitudinal characteristic energy in SiH₄+Ar gas

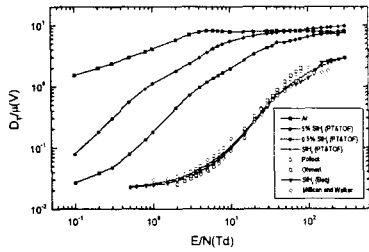


그림 7. SiH₄ + Ar가스에서 횡방향특성에너지
Fig. 7. Transverse characteristic energy in SiH₄ + Ar gas

4.5 평균에너지

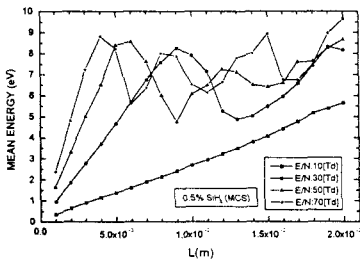


그림 8. SiH₄ + Ar가스에서 전자의 평균에너지
Fig. 8. Mean energy of electrons in SiH₄ + Ar gas

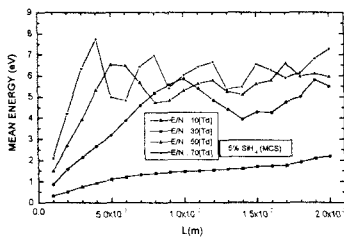


그림 9. SiH₄ + Ar가스에서 전자의 평균에너지
Fig. 9. Mean energy of electrons in SiH₄ + Ar gas

그림 8, 9에 0.5(%)와 5(%)의 SiH₄+Ar의 평균에너지를 각각 나타냈으며 샘플링의 차에 의하여 음극과 양극 가까운 영역의 전자의 평균에너지는 영점으로 부터 비탄성충돌이 일어날 에너지까지는 직선적으로 상승하여 비평형의 상태로 나타나고 그 외 영역에서는 거의 평형상태의 에너지값을 나타내었다. 전자의 평균에너지 ($\bar{\epsilon}$)와 특성에너지 (D/μ)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.

4.6 에너지 분포함수

전계를 인가한 혼합가스를 이동, 확산하는 전자군의 에

너지분포함수는 전·분자사이의 각종 충돌단면적 및 수송계수와 밀접한 관계가 있다. 따라서 전자에너지분포 $f(\epsilon)$ 은 전자수밀도를 정규화시키고, E/N를 변수로 하여 전계의 세기가 1~300(Td)인 범위에서 계산하였다. 그림 10, 11에 0.5(%)와 5(%)의 SiH₄+Ar혼합가스에 대한 전자에너지분포함수 $f(\epsilon)$ 를 나타내었다.

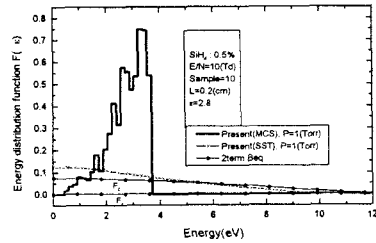


그림 10. SiH₄+Ar가스에서 전자에너지 분포함수
Fig. 10. Energy distribution function of electron in SiH₄+Ar gas

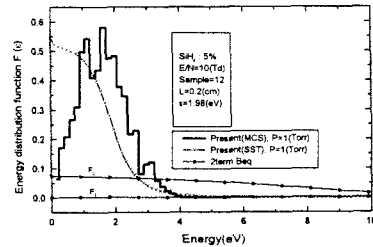


그림 11. SiH₄ + Ar가스에서 전자에너지 분포함수
Fig. 11. Energy distribution function of electrons in SiH₄+Ar gas

$F(\epsilon)$ 의 값은 초기에너지에서는 증가하고 그 이상의 전자에너지는 감소하는 경향이 나타났다. 이와 같은 현상은 SiH₄ 가스의 여기충돌과 진동여기 단면적의 공명효과 때문에 나타나는 것으로 생각된다.

5. 결론

본 논문에서는 SiH₄가스의 전자충돌단면적을 이용하여 E/N:1~300(Td), 혼합비(0.5%, 5%, SiH₄)에서 방전파라미터의 특성을 비평형 상태에서 몬테카를로 시뮬레이션과 볼츠만방정식으로 해석한 결과 다음과 같은 결론을 얻었다.

1. 0.5(%)와 5(%)의 미량의 SiH₄를 첨가함으로써 각종 수송계수 특히 이동속도와 특성에너지값이 크게 변화하는 경향이 나타났다.
2. SiH₄+Ar 혼합가스에서 전자에너지분포함수 $f(\epsilon)$ 구하였고 이 분포함수로부터 계산된 수송계수와 일치하는 운동량변환단면적, 여기 및 전리단면적을 결정하였다.
3. 특성에너지는 SiH₄+Ar혼합가스에서 혼합비율과 E/N에 비례하여 증가하고 단일 기체의 값보다 크게 나타났다.

(참고 문헌)

- (1) 大森義行, 下妻光夫, 田頭博昭, "SiH₄ 가스의 전자衝突斷面積およびスウォームパラメータ" 電気學會研究會資料, ED-86-114, HV-86-34, 1988
- (2) 倉知 正, "SiH₄-希가스混合氣體中における電子輸送係數に関する研究", 慶應義塾大學大学院 理工學研究室 修士學位論文, 1986.
- (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] 氣體放電 シミュレーション 技法, 第140号, 1974.

[5] 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.

[6] H. Itoh and T. Musha "Monte Carlo Calculations of Motions in Helium", J.Phys. soc. Japan, Vol.15, No.9, pp.1675-1680, 1960.

[7] R.W.L. Thomas, and W.R.L. Thomas, "Monte Carlo Simulation of electrical discharge in gases", J. Phys. B, Vol. 2, pp.562-570, 1969.

[8] 박원석, Na/Ar 혼합기체에서 전자군의 에너지 분포함수와 수송계수의 특성에 관한 연구, 동국대학교 대학원 석사학위논문, 1990.