

SiH₄-Ar혼합기체의 평균에너지

김상남*
인천전문대학

The mean Energy in SiH₄-Ar mixtures

Sang-Nam Kim
Incheon City Collcge

Abstract - This paper calculates and gives the analysis of electron swarm transport coefficients as described electric conductive characteristics of pure Ar, pure SiH₄, Ar-SiH₄ mixture gases (SiH₄-0.5%, 2.5%, 5%) over the range of E/N = 0.01~300[Td], P=0.1, 1, 5.0[Torr] by Monte Carlo the Backward prolongation method of the Boltzmann equation using computer simulation without using expensive equipment.

The results have been obtained by using the electron collision cross sections by TOF, PT, SST sampling, compared with the experimental data determined by the other author. It also proved the reliability of the electron collision cross sections and shows the practical values of computer simulation.

1. 서 론

최근에 각종 기체플라즈마를 사용한 반도체제조 프로세싱 기술이 많이 사용되고 있다. Plasma CVD 기술에서는 SiH₄, SF₆, CF₄, SiH₄-Ar, CF₄-N₂ 같은 分子들이 자주 사용되며[1], 그 중에서도 SiH₄ (monosilane)가스는 플라즈마 CVD (Chemical Vapor Deposition)에 의한 Silicon 박막성형, 액정구동용 박막트랜지스터, 초LSI用 절연막, 반도체의 에칭공정 및 기능성 박막의 생성등 공업적으로 이용되고 있으며 그리고 이것은 라디오파(Radio Wave) 및 마이크로파(Micro Wave)전계로 여기시켜 전자와 SiH₄ 分子와의 충돌로 SiH₄ 分子의 해리반응을 거쳐 수소화 비정질실리콘(a-SiH)을 제조할 때 원료가스로 이용된다. [2,3,4].

본 연구에서는 SiH₄-Ar 혼합기체 중에서 몬테칼로 시뮬레이션, 볼츠만 방정식의 Backward prolongation법에 의해 수치해석으로 전자에너지분포함수 f(e)을 구하고 전기전도 특성을 나타내는 전자이동속도(W)와 전리계수(a/N), 종·횡축방향의 확산계수(ND_L, ND_T), 전자의 특성 에너지(DL/μ), 평균에너지 (ē)등의 전자수송특성을 SiH₄-Ar혼합기체(SiH₄-Ar 혼합기체 중에 있어서 SiH₄ 농도: 0.5%, 2.5%, 5%)에 대해서 E/N : 0.01~300[Td] [E: 전계, N:기체분자 수밀도, 1[Td] = 1×10¹⁷ [V·cm²], N : 3.5353×10¹⁶ [cm⁻³] 0 [°C], 1 [Torr]에 해당]와 P₀ : 0.5, 1.0, 5.0 [Torr]범위에서 비등방성 산란을 고려하여 계산하여 전자수송특성을 고찰하였다. 그리고 전자충돌단면

적의 타당성에 대하여 검토하고 평균에너지에 따른 전자 에너지분포함수를 볼츠만 방정식에 의한 PT, TOF, SST 의 전자 스왈 법과 몬테칼로 시뮬레이션으로 계산한 전자군 파라미터를 해석하였다.[1,2,3]

2. MCS - BEq법의 이론

본 논문의 이론적인 해석은 몬테칼로법(MCS)과 볼츠만법(BEq)을 이용하여 전자에너지 분포함수와 전자군 파라미터를 구하는 것으로 이것은 [0~1]사이에 일정한 분포를 갖는 난수(Random number)를 이용하여 충돌의 종류, 산란후의 방향 및 비행시간 등을 결정하면서 전자의 운동을 반복 추적한다.

난수를 이용하여 충돌현상을 확률적으로 취급하고 사용한 난수를 계산기에 발생시켜 [0,1] 사이에 대응할때 독립한 난수열을 다수회 시행하여 평균치를 계산기로 구하는 것이다. 난수를 변수 θ와 dθ의 미소 범위에서 발생하는 확률을 f(θ)dθ로 나타내면 다음과 같이 식 (1)으로 나타낸다.[5,6,7]

$$\int_0^{\theta_{max}} f(\theta)d\theta = r \quad (1)$$

여기서 r은 0~1사이에 균일하게 분포되어 있는 난수이다. 본 연구에서는 산술난수인 승적합동법으로 의사난수(擬似亂數)를 구하여 사용하고 승적합동법은 다음과 같은 난수발생법으로 나타낸다.

$$Y_{k+1} = ar_k + c \pmod{m} \quad (2)$$

식(1)에 의해서 순차적으로 r₁, r₂, r₃, ... r_k를 발생시켜가는 방법이다. 여기서 a, c, m은 정의 정수이며 본 논문의 프로그램에서는 다음의 값을 이용하였다.

$$a : 1229, c : 351750, m : 1664501$$

이 경우에 ar_k + c를 m으로 나누어서 남은 나머지를 의미한다. 또한 r_k에 대해서는

$$S_k = \frac{r_k}{m} \quad (3)$$

으로 계산하면 S_k는 구간 [0, 1] 사이의 일정한 분포의 난수가 된다. 이 방법으로 발생한 난수 r_k는

$0 \leq r_k \leq m-1$ 를 찾아내어 m 개를 생성하고 계속 반복된다.

TOF 에서는 전자의 위치와 시간을 지정하기 때문에 샘플수가 적으며 에너지분포를 구할 때에도 샘플수는 적게 되어 통계적 변동을 많이 포함하는 결과를 나타낸다. TOF 샘플링법으로 방전공간의 전자수송계수를 구하기 위해서는 시간 t_k, t_{k+1} 에서 전자의 샘플수를 M_k, M_{k+1} 위치 영역을 $Z_i(t_k)$ 로하면 시간 t_k 에서의 전자군 중심의 평균위치 $\langle Z_i(t_k) \rangle$ 는 다음과 같이 식(4)으로 나타낸다.[6]

$$\langle Z(t_k) \rangle = \frac{1}{M_k} \sum_{j=1}^{M_k} Z_j(t_k) \quad (4)$$

전자군의 중심 이동속도 W 는 다음과 같다.

$$W = \frac{\langle Z(t_{k+1}) \rangle - \langle Z(t_k) \rangle}{t_{k+1} - t_k} \quad (5)$$

한편 전자의 확산계수는 시간 t_k 일때 전자의 전계방향의 중심위치를 $Z_m(t_k)$ 라하면 종방향 확산계수 D_L 은

$$D_L = \frac{1}{2!M_k} \sum_{j=1}^{M_k} \{Z_j - Z_m(t_k)\}^2 \quad (6)$$

식(5)의 시간에 대한 기울기로 나타낸다.

그리고 횡방향 확산계수 D_T 는 전계에 직각방향으로 위치가 분산되어 다음과 같이 시간에 대한 기울기로 나타낸다.

$$D_T = \frac{1}{2} \frac{1}{2!M_k} \sum_{j=1}^{M_k} (r_j)^2 \quad (7)$$

여기서 r_j 는 Z_j 의 직각방향의 성분이다.

평균에너지 $\langle \bar{\varepsilon} \rangle$ 는 i 번째의 에너지를 ε_i 라고 하면

$$\langle \bar{\varepsilon} \rangle = \frac{1}{M_k} \sum_{j=1}^{M_k} \varepsilon_j \quad (8)$$

로 나타낸다.

그리고 전자사태의 공간성장과정이 정상상태 일 때 전자군 파라미터를 이용하여 전리계수, 부착계수 및 실효 전리계수는 2항 근사에 의한 볼츠만 방정식의 해석에서 아래 식 (9), (10)으로 나타낸다.[5][6]

$$\alpha = \frac{v_{is}}{\frac{\overline{W_s}}{2} + \left\{ \left(\frac{\overline{W_s}}{2} \right)^2 - (v_i - v_a) D_s \right\}^{\frac{1}{2}}} \quad (9)$$

$$\eta = \frac{v_{as}}{\frac{\overline{W_s}}{2} + \left\{ \left(\frac{\overline{W_s}}{2} \right)^2 - (v_i - v_a) D_s \right\}^{\frac{1}{2}}} \quad (10)$$

여기서 v_i 는 전리주파수, v_a 는 부착주파수이다.

본 시뮬레이션에서는 전계의 분포에 대응하는 전극간의 분해거리, 위치를 분해한 Sample, 그 때 전자가 도달하는 시간(Time), 전자의 종방향 거리(R*R), 전자의 횡방

향 거리(D_L) 및 그 점의 전자에너지 등과 전자궤도에서 전리가 일어난 경우에 2차 전자, 난수(Random Number : 13)등을 양극에 도달할 때까지 반복 추적하여 SPARK WORK STATION (SS-20)을 이용하여 시뮬레이션 하였다.

3. 시뮬레이션 방법

3.1 시뮬레이션 조건

다음의 기본조건하에서 몬테칼로 시뮬레이션과 볼츠만 수치해석이 수행되어졌다.

표 3.1 시뮬레이션 조건
Table 3.1 Simulation condition

Gas	Pressure [Torr]	E/N [Td]	Temperature [K]
SiH ₄	0.5	0.5~300	300
	1		
	2.5		

3.2 몬테칼로 시뮬레이션

SPARC WORKSTATION에서 몬테칼로 시뮬레이션의 순서도는 그림 3.1과 같이 나타내며 계산된 MCSB프로그램의 내용을 나타내고 있다.

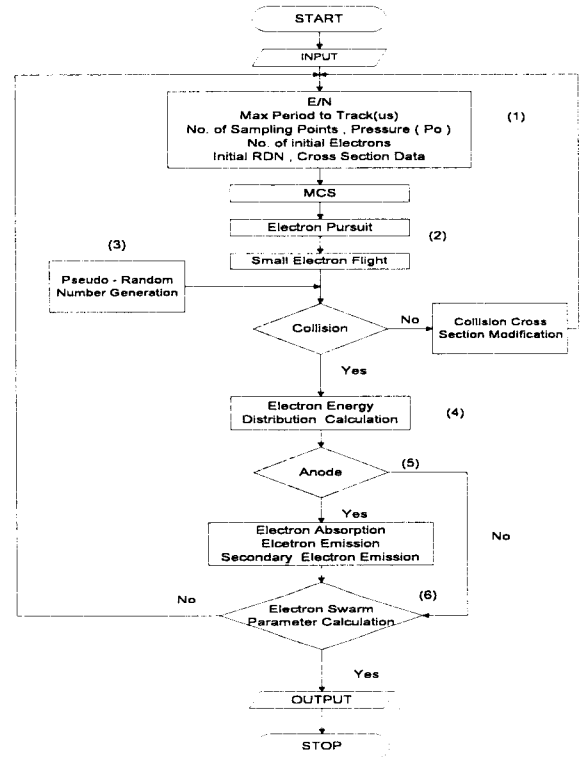


그림 3.1 몬테칼로 시뮬레이션의 순서도

Fig. 3.1 Flowchart for Monte Carlo simulation

본 시뮬레이션은 평행평판 전극간에 방출된 초기전자가 전계에 의하여 포물선운동을 하면서 중성분자와 충돌산란으로 2차 전자가 전극사이에서 발생하고 비탄성충돌

에 의한 전자에너지 손실이 이루어 질 때까지를 몬테칼로 방법으로 추적한다. 프로그램의 내용은 다음과 같다.

- (1) 전계(E/N), 전자 수, 초기 전극간 분할(Sampling point: 20), 초기 난수 (Initial random number:13), 압력 및 충돌단면적을 입력한다. (2) 전자를 추적하여 미소전자의 비행이 시작되면서 (3) 컴퓨터에서 난수 발생한다. (4) 충돌이 발생하면 전자에너지 분포함수를 계산하고 충돌이 발생하지 않으면 충돌단면적을 수정한다. (5) 전자가 양극에 도착하면 전자의 흡수, 이차전자방출이 발생하고 양극에 도착하지 않으면 전자군 파라미터를 계산한다.
- (6) 전자군 파라미터를 계산하면 프로그램을 끝내고 계산되지 않으면 처음으로 돌아간다.

3.3 볼츠만 시뮬레이션

본 논문에서의 볼츠만 시뮬레이션은 각각의 E/N에 대하여 분포함수의 최대 에너지값(ϵ_{max})을 찾아내어 각 등분마다 분포함수를 산출하여 전자에너지 분포함수를 구하고 이 분포함수로 부터 각종 수송계수를 산출해낸다.

이러한 전자군 파라미터를 예측해내는 시뮬레이션 기법은 다음 장에서 논의되는 충돌단면적과 더불어 플라즈마 프로세싱 연구의 중요한 기초가 된다.

본 연구의 SPARC WORKSTATION(SS-20)에 JILA Information Center에서 제공된 "Description of a Backward Prolongation Program for Computer Transport Coefficients"

소프트웨어를 내장시켜 볼츠만 방정식을 수치 해석하여 전자에너지 분포함수를 구하고 각종 전자수송계수를 산출하였다.

위 Backward Prolongation Program의 내용은

- (1) 각종 참고문헌에서 참조한 탄성 충돌단면적과 비탄성 충돌단면적을 입력하고 Loop 반복 횟수를 결정한다.
- (2) 전리 충돌항의 제 1항과 탄성 충돌항의 제 1항을 계산한다.
- (3) 비탄성 제 2충돌항은 첫 번째 Loop에서는 낮은 에너지 분포함수로 계산하고 두 번째 Loop 이후부터 계산한다.
- (4) $F(\epsilon)$ 에 의해 $D(\epsilon)$ 을 계산한다.
- (5) Backward Prolongation에 의해 $F(\epsilon)$ 을 계산한다.
- (6) 구해진 에너지 분포함수를 $\int_0^{\infty} \epsilon \frac{1}{2} f(\epsilon) d\epsilon = 1$ 에 의해 정규화한다.
- (7) 구해진 충돌단면적 Q값과 반복 loop에서의 Q값을 비교하여 그 차이가 주어진 조건에 합당한가를 판단한다.
- (8) 확정된 $f(\epsilon)$ 값을 이용하여 각종 전자수송계수를 계산한다.

4. 전자 충돌 단면적

4.1 Ar 충돌단면적

Ar가스는 플라즈마 CVD, 가스레이저, 형광등 등에서 이용되며, 공학적 이용도 넓고 중요하다. 이 때문에 Ar 가스중의 전자의 운동을 아는 것은 대단히 중요하며, 현재까지 많은 실험적, 이론적 연구가 진행되고 있다. 그 중에서도, 전자 스왈 파라미터와 충돌 단면적에 관한 조사와 연구는 많이 행해진다.

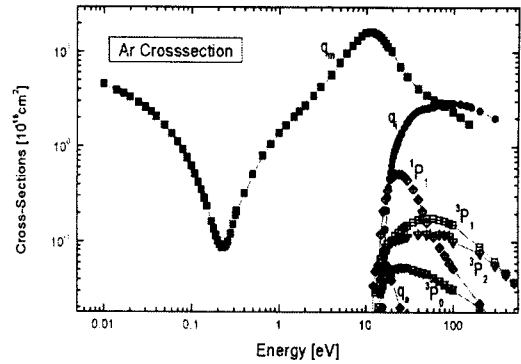


그림 4.1 Ar가스의 충돌단면적
Fig. 4.1 The cross-sections in Ar gas

본 논문에서는 Ar가스의 운동량 이행 단면적(이하 q_m 이라한다.)을 0.01~150(eV)에서 추정된 결과를 보고한다. 이것은 Ar가스의 충돌단면적의 Ramsauer Minimum 및 q_m 의 피크값을 포함한 것이다. Ar가스의 q_m 에서 현재 관심을 갖는 것은 Ramsauer Minimum이 어느 eV 정도에서 존재하고, 또한 그것이 어느 정도의 값을 갖는가 하는 점이다.

해석에 이용한 Ar의 전자 충돌 단면적은, 운동량 이행 단면적 q_m , 전자 여기 단면적 q_{ex} , 전리 단면적 q_i 의 3종류이다. 이들의 충돌 단면적을 그림4.1에 나타낸다. 단, 전자 여기 단면적 q_{ex} 에 관해서는, 4종의 단면적을 총화의 형($\sum q_{ex}$)으로 볼 수 있다. 또한 부착 단면적 q_a 도 나타낸다. 해리 단면적은 좁은 범위에 작은 값을 가지는 것을 알 수 있다.

4.2 SiH4 충돌단면적

충돌 단면적은 전자의 거시적 특성을 이용하는데 기초적 자료로서 중요하며 전자수송특성에 관한 정보를 알 수 있고 에칭 가스에서는 여기 단면적(q_{ex})과 해리 단면적(q_a)이 중요하다.[7] 충돌 입자간의 상호작용으로 기체분자의 여기, 해리, 이온화 등의 반응으로 여기 단면적, 해리 단면적, 이온화 단면적 등으로 나타내며 전충돌 단면적은 개개의 반응과정의 합으로 나타낸다. 본 연구에 이용한 전자 충돌 단면적은 Haller, Tossell[8,9]의 값을 이용하여 계산하였고 그림 4.2에 나타낸다. 본 해석에는 이항근사에 의한 볼츠만 해석을 이용하여 정리된 충돌단면적을 이용했다. 이 것은, 운동량 변환 단면적 Q_m , 2개의 진동 여기 단면적 Q_v , 전자 부착 단면적 Q_a , 해리 단면적 Q_d , 전리 단면적 Q_i 의 총 6개의 충돌 단면적으로 되어 있지만[7] 전자 부착 단면적에 관해서는 고려하고 있

지 않다.

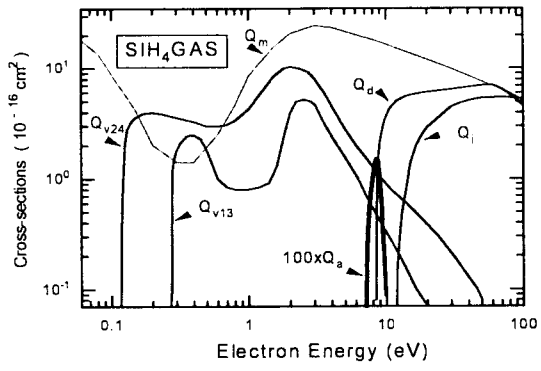


그림 4.2 SiH₄가스의 電子충돌단면적
Fig. 4.2 Collision cross section of electrons in SiH₄

5. 결과 및 고찰

그림 5.1에 SST에 의한 SiH₄-Ar가스의 평균에너지를, 그림 5.2과 그림 5.3에 MCS에 의한 SiH₄-Ar가스의 평균 에너지를, 그리고 그림 5.4에 SiH₄가스의 평균에너지를 나타냈다. 그림 5.1에 나타난 Ar가스는 E/N = 5[Td]까지 급격히 증가한 후 그 이후에는 완만한 증가를 보이고 SiH₄가스에서는 E/N=2[Td]까지 완만한 증가를 보이다가 E/N이 증가함에 따라 증가한다. 또한, 그림 5.2, 그림 4.3에는 각각 SiH₄가스를 0.5%, 5% 첨가한 SiH₄-Ar혼합가스의 평균에너지를 나타냈으며 샘플링의 차에 의하여 음극과 양극 가까운 영역의 전자의 평균에너지는 영점으로부터 비탄성충돌이 일어날 에너지까지는 직선적으로 상승하여 비평형의 상태로 나타나고 그 밖의 영역에서는 거의 평형상태의 에너지값을 나타내었다.

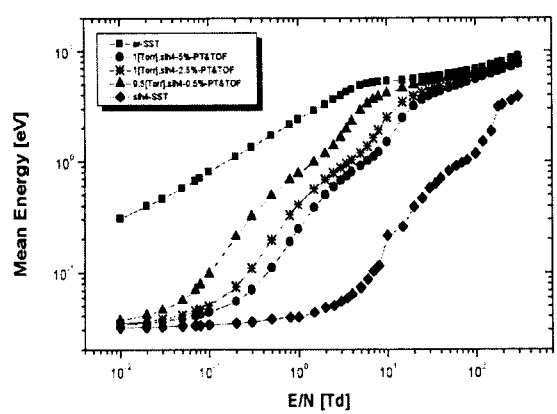


그림 5.1 SiH₄-Ar 가스의 평균에너지
Fig. 5.1 The mean Energy in SiH₄-Ar gas

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/2배가 될 때 그 값이 일치한다. 또한, SiH₄-Ar 혼합가스에 있어서는 압력이 낮은

(0.5Torr) 것이 큰 평균에너지 값을 가지며, SiH₄ 혼합비율이 높을수록 큰 평균에너지 값이 나타난다.

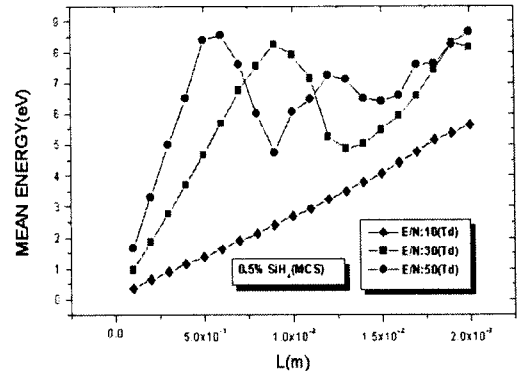


그림 5.2 SiH₄-Ar 가스의 평균에너지
Fig. 5.2 The mean Energy in SiH₄-Ar gas

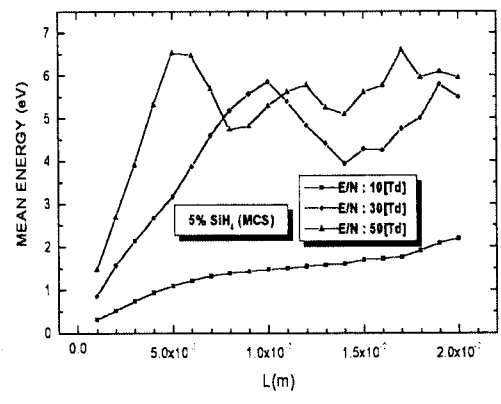


그림 5.3 SiH₄-Ar 가스의 평균에너지
Fig. 5.3 The mean Energy in SiH₄-Ar gas

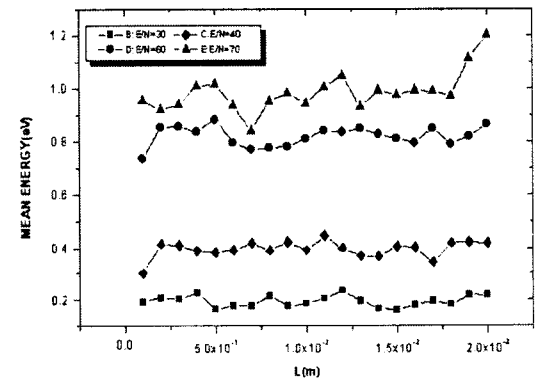


그림 5.4 SiH₄ 가스의 평균에너지
Fig. 5.4 The mean Energy in SiH₄ gas

그림 5.2와 그림 5.3에서 있어서는 압력 P=1(Torr)에서 측정하였다. 그림 5.2와 그림 5.3에서는 모두 저 E/N에서는 길이 L에 의존하고 있다는 것을 알 수 있으며,

E/N이 점차 커질수록 E/N이 낮을 때와는 달리 매우 불규칙한 평균에너지를 갖는다는 것을 안다. 그림 5.4에서는 그림 5.1에서 나타낸 것과 같이 E/N이 낮을 때는 안정적인 평균에너지 값을 가지나, E/N이 높을 때는 불규칙한 평균에너지 값을 나타낸다는 것을 알 수 있다.

5. 결 론

Ar가스의 운동량 이행 단면적(q_m)을 0.01~150 [eV]에서 추정된 결과는, 운동량 이행 단면적(q_m)이 저에너지영역($\epsilon \leq 0.7\text{eV}$)에서 Ramsauer Minimum인 것을 알 수 있다. 또한 이동속도(W)와 종방향 확산계수(ND_L)에 있어서 이동속도(W)는 E/N에 따라 증가하는 것을 종방향 확산계수(ND_L)는 E/N=5[Td]까지는 감소하다 그 이후에는 E/N=10[Td]까지는 급격히 증가하는 부구배(NDC : Negative Differential Conductivity)의 특성을 파악할 수 있었으며, Ar가스에 미량 SiH_4 가스를 혼합한 각 SiH_4 -Ar 혼합 기체 중에 있어서의 이동속도(W)와 종방향 확산계수(ND_L)는, 순수 Ar가스에서의 이동속도(W)와 종방향 확산계수(ND_L)에 비교해 큰 변화를 보이며, 이동속도(W)는 부구배를 나타내었다.

[참 고 문 헌]

- Soc, 64, pp.2919-26, 1988.
- [14] 12. Cottrell T.L, Walker.I.C Tranc, Faraday Soc.61, pp.1583-1593, 1965.
- [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電子衝突斷面積およびスウオ-ムベラメ-タ" 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 "プラズマと成膜の基礎", 日刊工業新聞社, pp.13-20, 1993.
- [5] 大森義行, 下妻光夫, 田頭博昭, "SiH₄ 가스의電子衝突斷面積およびスウオ-ムベラメ-タ" 電氣學會研究會資料, ED-86-114, HV-86-34, 1988.
- [6] 氣體放電 シミュレーション技法(제140호), 1974.
- [7] C. Jacoboni and P. Lugli, "The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation", Springer-Verlag Wien, pp.1-4, 1989.
- [8] Philip. E. Luft, "Description of a Backward prolongation program for computin transport coefficients", JILA. information center report, No. 19, 1975.
- [9] 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. 813-21, 1984.
- [10] 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.
- [11] M. Hayashi, "Swarm Studies and Inelastic Electron-Molecule Collisions", L. C. Pitchford, Springer-Verlag, 1986.
- [12] M. Kurachi, Y. Nakamura "Electron collision cross sections for the monosilane molecule", J.phys.D: Appl. phys.22, pp.107-112, 1987.
- [13] Pollock WJ, "Momentum Transfer and Vibrational Cross-sections in Non-polar Gases" Trans. Faraday.