

GeH₄ 기체의 전자수송계수에 관한 연구

류선미*, 전병훈*
동국대학교*

A study on the electron transport coefficients in GeH₄ gas

Sun-Mi Ryu*, Byung-Hoon Jeon*
Dongguk University*

Abstract - For quantitative understanding of gas discharge phenomena, we should know electron collision cross section. GeH₄ is used in many applications with Si₂H₆ gas, such as amorphous alloy, a thin film of silicon and solar cell. Therefore, we understand the electron transport characteristics and analysed the electron transport coefficients, the electron drift velocity W, the longitudinal and transverse diffusion coefficient ND_L and ND_T, and the ionization coefficient α/N in GeH₄ gas over the E/N range from 0.01 to 1000 Td by two-term approximation of the Boltzmann equation.

회축확산계수 D_T는 전계와 직각방향의 위치분산으로 표현하며, 시간에 대한 기울기로 구하며 r_j는 Z_j의 직각방향의 성분이다.

$$D_T = \frac{1}{2} \frac{1}{2! M_k} \sum_{j=1}^{M_k} (r_j^2) \tag{2.4}$$

그리고 SST(Steady State Townsend Experiment)에 의해 전리주파수를 얻어 전리주파수와 이동속도의 관계로부터 전리계수의 값을 구할 수 있다.[4]

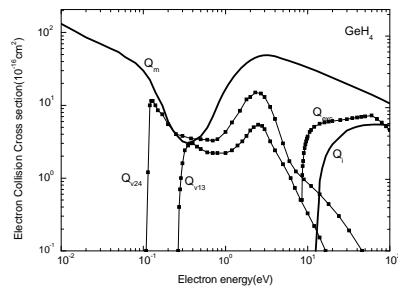
1. 서 론

기체의 방전현상은 전자, 이온, 광자 등 각 입자의 상호작용으로 발생 되는 매우 복잡한 현상으로 나타난다. 그러므로 이와 같은 현상들을 정량적으로 해석하기 위해서는 전자수송계수 즉, 전자이동속도, 전리계수, 부착계수, 종횡방향의 확산계수 등을 이해하여야 한다. 그리고 이를 위해 그 기체가 가지고 있는 전리충돌단면적, 전자에너지분포함수 등에 대한 정확한 해석이 필요하다.[1] 이와 같은 기체중의 전자군 운동 특성을 연구하기 위해서는 2항 근사와 다항근사의 볼츠만 방정식 해법과 몬테카를로 시뮬레이션 기법이 있으며 본 연구에서는 2항 근사에 의한 방법에 의해 해석한다.

2.2 전자 충돌 단면적

본 논문에서 사용한 GeH₄ 가스의 전자충돌단면적을 그림 1에 나타내었다. 이들 충돌단면적은 전자의 특성을 파악하는 기초자료로서 상당히 중요하며, 각각의 단면적의 구조적 특성은 2항 근사 볼츠만 방정식의 적용을 이해하는데 도움이 되리라 보여 진다.

GeH₄ 가스는 비정질합금과 실리콘을 이용한 박막에 사용되고 있으며, 최근에는 Si₂H₆ 가스와 함께 태양광, 태양전지 분야에도 이용이 되고 있다. 태양광 발전의 박막증착은 화합물 반도체를 포함하는데 게르마늄 박막 증착 형성에는 본 가스가 반드시 필요하여 그 이용이 기대되고 있는 추세이다. 본 연구에서는 GeH₄ 기체의 전기전도 특성을 나타내는 전자 이동속도(W), 전자의 종방향 확산계수(ND_L), 횡방향 확산계수(ND_T), 전리계수(α/N)를 지금까지 보고된 GeH₄ 단면적의 데이터를 가지고 2항 근사 볼츠만 방정식을 이용하여 전자수송에 관한 특성을 이해하고 물성적으로 해석한다.



<그림 1> GeH₄ 기체의 전자충돌단면적

2. 본 론

2.1 2항 근사 볼츠만 방정식

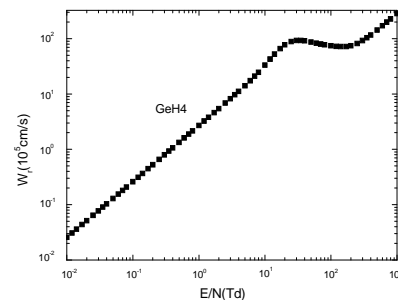
기체 중에서 하전입자군의 수송계수를 측정하는 방법 중의 하나인 2항 근사와 다항근사의 볼츠만 방정식은 TOF(time of flight) 샘플링 방법을 이용하여 가스들의 전자수송계수를 산출하는데, 이는 열평형 상태가 아닌 다입자계(多粒子系) 운동의 기술을 이용해 전자군의 거동해석에 이용하고 있다.[2]

GeH₄ 기체의 전자충돌단면적은 H. Soejima and Y. Nakamura.[5]에 의한 실험값을 사용하여 나타내었다. 이 GeH₄ 기체의 운동량 변환 단면적은 에너지가 3 eV에서 49×10⁻¹⁶cm² 으로 최대값을 나타내었으며, 진동여기단면적(Q_{v13}, Q_{v24})의 문턱에너지(Threshold 에너지)는 각각 0.37 eV 와 0.125 eV의 값을 가지고 있으며 RTM의 Q_m을 가지고 있다.

전자의 속도분포함수를 Legendre 급수로 전개하고, 그 최초의 2항으로 근사하는 2항 근사는 전자수송계수를 산출하기 위한 소요시간은 비교적 짧으나 비등방성이 강한 경우에는 정확한 계수를 산출할 수 없는 단점이 있다.[3] TOF법으로 시간 t_k, t_{k+1}에서 전자의 샘플 수를 M_k, M_{k+1}로 하고 위치영역을 Z(t_k)로 할 때, 식 2.1은 전자군 중심의 평균위치를 나타내며 이에 따른 전자군의 이동속도 W는 식2.2에 나타난다.

2.3 결과 및 고찰

2.3.1 전자이동속도



<그림 2> GeH₄ 기체의 전자이동속도

$$\langle Z(t_k) \rangle \geq \frac{1}{M_k} \sum_{j=1}^{M_k} Z_j(t_k) \tag{2.1}$$

$$W = \frac{\langle Z(t_{k+1}) \rangle - \langle Z(t_k) \rangle}{(t_{k+1} - t_k)} \tag{2.2}$$

종축확산계수 D_L는 전계방향의 위치분산으로 표현하여 아래 식2.3과 같이 되며, 시간에 대한 기울기로 그 값을 구할 수 있다.

$$D_L = \frac{1}{2! M_k} \sum_{j=1}^{M_k} Z_j - Z_m(t_k)^2 \tag{2.3}$$

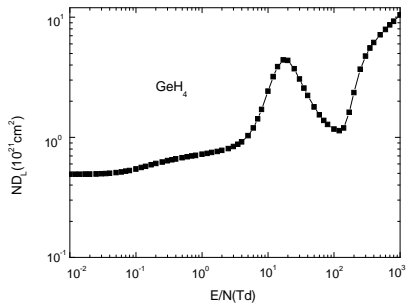
그림 2는 전자군 수송계수에 따른 이동속도를 0.01에서 1000 Td에 이르는 E/N 범위에서 2항 근사 볼츠만 방정식을 이용하여 본 기체의 계

산 결과를 보여주고 있다.

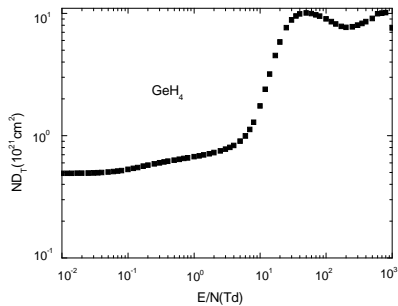
그림 1에서는 GeH_4 가스의 운동량변환단면적(Q_m)의 Ramsauer Townsend minimum과 여기에 커다란 진동여기단면적이 존재하므로 진동여기충돌에 의해서 낮은 에너지대의 전자가 많기 때문에, 전자에너지의 커다란 순환이 발생하고 완화시간의 감소로 각각의 압력에 따른 $E/N : 25\sim 50$ Td 영역에서 전계 E/N 이 증가함에 따라 전자이동속도가 감소하는 현상 즉 부구배전도도(NDC : Negative Differential Conductivity)의 특성을 보여주고 있다.[6]

2.3.2. 확산계수

그림 3과 4는 본 기체의 종축확산계수 D_L 과 횡축확산계수 D_T 를 기체 분자수밀도 N 과의 곱의 관계로 하여 E/N 함수로 나타낸 것이다.



<그림 3> GeH_4 기체의 종 방향확산계수

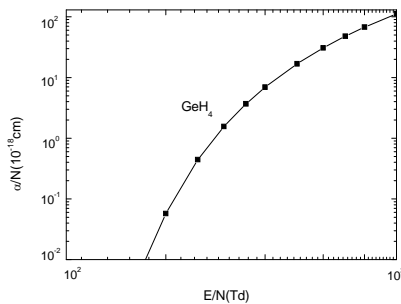


<그림 4> GeH_4 기체의 횡 방향확산계수

이들은 그림 2에서 보여준 전자이동속도의 결과와 같이 낮은 E/N 영역에서 열평형 상태를 보이다가 전계가 가해지면서 확산계수가 증가하고 이는 급격히 증가하다 감소하는 NDC 현상을 뚜렷하게 보여준다. 그림 3과 그림 4에서 알 수 있듯이 종 방향확산계수 ND_L 과 횡 방향확산계수 ND_T 는 E/N 이 증가함에 따라 서서히 증가하고 있다. ND_L 은 $20\sim 140$ Td, ND_T 는 $60\sim 200$ Td 영역에서 급작스럽게 NDC 현상을 보여주고 있다. 본 기체의 경우 50 Td 영역에서 여기단면적의 영향으로 급격히 증가하다가 10^2 eV 부근에서 비탄성충돌 단면적의 영향으로 미세한 포화영역을 보이고 있다.

2.3.3. 전리계수

그림 5는 GeH_4 기체의 전리계수를 E/N 의 함수로 나타낸 것이다.



<그림 5> GeH_4 기체의 전리계수

본 기체의 충돌 전리계수의 크기는 증감의 변화가 정량적으로 나타났으며 전리전압이 높은 값 이상에서 전리에너지의 상승으로 기체방전 현상에 영향을 미친다고 볼 수 있다. 그리고 E/N Td 영역이 증가함에 따라

라 전리가 늦게 형성되어 증가하는 모습을 볼 수 있는데, 이는 전자가 기체와 충돌하여 이온화과정을 발생시킬 수 있는 과정에서 전리충돌단면적의 문턱에너지가 낮아 여기단면적과의 간격이 짧아 늦게 형성됨을 알 수 있다.

3. 결 론

GeH_4 가스의 전자수송계수를 $0.01 \text{ Td} \leq E/N \leq 1000 \text{ Td}$ 의 범위에서 2항 근사 볼츠만 방정식의 해법을 이용하여 이동속도, 확산, 전리계수를 구하고 해석하였다. 또한 운동량변환단면적에 의해 정량적으로 NDC 현상이 뚜렷하게 보이고 있으며 전자충돌단면적의 타당성을 확인하였다. 이는 목적에 맞는 플라즈마를 만들기 위한 기체의 종류나 기체압력, 혼합비 등의 평가를 할 때, 컴퓨터에 의한 시뮬레이션은 효과적인 수단이며 이를 통한 정량적 분석이 되기 위해서는 목적으로 하고 있는 가스의 전자충돌단면적의 정확한 이해와 해석이 꼭 필요함을 알 수 있다. 본 기체는 비정질합금이나 실리콘 박막 그리고 태양전지에 혼입되어 이용이 되는 기체로서 함량 비율 증가에 따라 녹는 온도감소로 열 부담이 줄어들고 상결정화가 가능해지는 연구가 계속되는 가운데 전자충돌단면적에 대한 기본적인 개념과 전자수송계수의 특성을 파악하고 해석하였으며, 지금까지 보고된 GeH_4 에 따라, 전자수송계수에 대한 데이터와 전자충돌단면적이 전무하므로 향후 이에 대한 정제된 전자충돌단면적의 수정이 요구되어 진다.

[참 고 문 헌]

- [1] S. C. Ha and Y. S. Ha, "The Measurement of Electron Drift Velocity and Analysis of Transport Coefficients in $\text{SF}_6 + \text{N}_2$ Gas", J. of KIEEME, Vol.7, pp. 462-472, 1994
- [2] S. C. Ha and B. H. Jeon. "An application of Two-term and Multi-Term Approximation of Boltzmann Equation to Electron Swarm Method", J. of KIEEME, Vol.15, pp. 285-290, 2002
- [3] B. H. Jeon. "The Analysis of Electron Transport Coefficients in Kr and Xe Atom Gas", J. of KIIEE, Vol.22, pp. 104-108, 2008
- [4] A. E. D. Heylen, "Influence of Molecular Bonding on the Townsend Ionization Coefficients of Hydrocarbon Gases", J. chem. phy, Vol.38, pp. 765-771, 1963
- [5] H. Soejima and Y. NaKamura, "Monogermane(GeH_4)", J. Vac. Soc. Technol. A, Vol.11, pp. 1161-1164, 1993
- [6] H. Y. Lee, S. K. Paek and S. C. Ha. "The Analysis of the Electron Drift Velocity and Characteristics Energy in SiH_4 Plasma gas by Electron Swarm method", J. of KIEEME, Vol.12, pp. 233-238, 1999