고밀도 유도결합 플라즈마원 유체 수송 시뮬레이션을 위한 모델 및 수치해석 방법 비교

論 文
53C-8-6

Comparison of Models and Numerical Analysis Methods in Fluid Simulation of High Density Inductively Coupled Plasma Sources

權 得 哲* · 尹 南 植** · 金 貞 衡*** · 申 容 賢§
(Deuk-Chul Kwon · Nam-Sik Yoon · Jung-Hyung Kim · Yong-Hyeon Shin)

Abstract - Various models and various boundary conditions have been suggested for fluid transport simulations of high density plasma discharges such as the inductively coupled plasma discharge. In this work, we compare the various models using one-dimensional simulations based on the FDM(finite difference method), the upwind scheme, the power-law scheme, and the dielectric relaxation scheme[1]. Comparing the exactness, the numerical stability and the efficiency of the various models, the most adoptable model is suggested.

Key Words : Plasma, Simulation, 경계 조건, 수송, 유체

1. 서 론

현대 산업계에 응용되고 있는 플라즈마 기술은 나날이 그 필요성이 증대되고 있어서, 반도체 제작, LCD 등의 디스플레이 장치 제작, MEMS, 표면 처리 등을 비롯한 여러 분야에서 응용되고 있다.

플라즈마는 전자에 에너지를 인가하는 전자 가열 과정과 에너지를 얻은 전자가 중성종과 충돌해 이온화하는 과정을 통해 발생한다. 이러한 플라즈마 발생 과정에 대한 이해를 위해서는 비선형적인 지배 방정식으로 인해 수치 해석적 시뮬레이션을 통한 해석이 요구된다. 하전 입자 수송 모델은 연구 목적에 따라 입자 시뮬레이션(particle simulation), 운동 시뮬레이션(kinetic simulation), 유체 시뮬레이션(fluid simulation)[1-12], 하이브리드 시뮬레이션(hybrid simulation)[13-15] 등의 다양한 방법들이 응용되고 있는데, 플라즈마 발생과정에 대한 전반적인 조망에 가장 유용한 모델은 유체 시뮬레이션이다. 그러나 고밀도 플라즈마에 대해서는 플라즈마 주파수 ω_p가 크고 sheath 길이가 장치 길이에 비해 매우 작기 때문에 안정적인 수치 해석적 해를 얻는 데에 어려움이 있다는 것이 알려져 있다. 따라서 이러한 수치 해석적 시간 및 공간 간격에 인가되는 강력한 제약을 극복하기 위해 여러 가지 모델과 수치 해석 방법이 제시되어왔으며, 아울러 다양한 경계 조건들이 이용되어 왔다. 하지만 제안된 여러 모델 및 경계 조건들은 정확성과 효율성 면에서 충분히 비교, 검토된 바가 없어 시뮬레이션에 가장 적합한 방법을 선택하기에 어려움이 있는 상황이다.

그러므로, 본 연구에서는 모델과 경계조건을 중심으로 여러 방법들을 정확성과 수치 해석적 안정성 면에서 비교하여 가장 효율적인 시뮬레이션 방법을 제시하려 한다.

전자와 이온에 대한 하전 입자 수송 모델식은 유체 방정식과 포와송 방정식으로 구성되며, 전자와 이온을 따로 모델링하는 방법(이하 Model Ⅰ)[1,7-12]과, 준중성 상태를 가정해 이온에 대한 연속 방정식과 운동 방정식만으로 모델링하는 방법(이하 Model Ⅱ)[3-5]이 이용된다. 각각의 모델마다 다양한 경계 조건이 이용될 수 있으며, 크게 sheath를 포함하는 모델[1,8-12]과 sheath를 따로 모델링[3-6]하는 방법으로 구분할 수 있다. 한편으로 Model Ⅱ의 경계 조건에서, 유체 속도에 대한 경계 조건으로 Bohm 속도를 선택할 경우 Bohm sheath criterion[16]과 Persson's criterion[17]이 서로 상충하여 특이점이 발생될 수 있다는 지적이 되었다[5]. 이 문제를 극복하기 위한 경계 조건이 Godyak에 의해 제시[5]되었지만, 또 다른 수치 해석적 불안정성을 유발할 가능성이 Yoon에 의해 지적되었다[3]. 그러나 이러한 분석들은 해석적 식으로만 고려되었기 때문에 수치 해석적 방법이 도입되었을 경우에도 그러한 제약을 피할 수 없는 것인지는 분명치 않다.

일반적으로 공간 간격에 대한 안정성 제약은 upwind scheme[6]과 power-law scheme[6]등으로 극복할 수 있다는 것이 잘 알려져 있으며 시간 간격에 대한 제약은 massless electron 방법[11], semi-implicit 방법[13] 등이 제안되었고, 최근 연구에 의하면 dielectric relaxation 방법[1]이 massless electron 방법이나 semi-implicit 방법에 비해 효율적이라는 것이 밝혀졌다. 따라서 dielectric relaxation 방법, upwind scheme, 그리고 power-law scheme 등은 이미 널리 인정되고 있는 방법이라고 할 수 있으며 본 연구에서도 이러한 방법들은 공통적으로 적용되었다.

* 學生會員 : 忠北大學 電氣工學科 碩士課程
** 正 會 員 : 忠北大學 電氣電子컴퓨터工學部 副敎授
*** 正 會 員 : 韓國標準科學硏究院 硏究員
§ 正 會 員 : 韓國標準科學硏究院 責任硏究員
接受日字 : 2004년 5월 14일
最終完了 : 2004년 6월 23일

2장에서는 비교되는 모델의 기본 방정식과 적용될 수 있는 경계 조건들을 정리하였고, 3장에서는 제안된 여러 모델들을 1차원 시뮬레이션을 통해 정확성과 수치 해석적 안정성 및 효율성 면에서 비교 검토하였다. 4장에서는 3장의 결과로부터 알 수 있는 사실들을 종합하여 정리하였다.

2. 모델 및 경계 조건 설명

전자 및 이온 등의 하전 입자 수송에 대한 모델식은 유체 방정식과 프와송 방정식으로 구성되며, 전자와 이온을 따로 모델링하는 Model Ⅰ과, 준중성 상태를 가정해 이온에 대한 연속 방정식과 운동 방정식만으로 모델링하는 Model Ⅱ가 이용된다. 그리고 각각의 모델마다 다양한 경계 조건이 이용될 수 있으며 크게 sheath를 포함하는 모델과 포함하지 않는 모델로 구분할 수 있다.

2.1 Model Ⅰ : 준중성 조건을 쓰지 않는 모델

일반적으로 전자 및 이온의 수송 모델은 다음과 같이 전자와 이온에 대한 연속 방정식, 운동 방정식, 프와송 방정식과 온도 방정식으로 주어진다[18].

$$\frac{\partial n_e}{\partial t}+\nabla\cdot(\Gamma_e)=R_e \tag{1}$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t}+\nabla\cdot(\Gamma_i)=R_e \tag{2}$$

$$\frac{\partial \Gamma_e}{\partial t}+\nabla\cdot(\Gamma_e \mathbf{v}_e)=-\frac{en_e}{m_e}\mathbf{E}-\frac{\nabla(n_eT_e)}{m_e}-\nu_{eN}\Gamma_e \tag{3}$$

$$\frac{\partial \Gamma_i}{\partial t}+\nabla\cdot(\Gamma_i \mathbf{v}_i)=\frac{en_i}{M_i}\mathbf{E}-\frac{\nabla(n_iT_i)}{M_i}-\nu_{iN}\Gamma_i \tag{4}$$

$$\nabla\cdot\mathbf{E}=4\pi e(n_i-n_e) \tag{5}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{3}{2}n_eT_e\right)+\nabla\cdot\left(\frac{3}{2}n_eT_e\mathbf{v}\right)+n_eT_e\nabla\cdot\mathbf{v}+\nabla\cdot\mathbf{q}_e=P_{ext}-P_{coll} \tag{6}$$

여기서 n_e는 전자밀도이고 n_i는 이온밀도, Γ_e는 전자 플럭스, Γ_i는 이온 플럭스이다. R_e는 $\nu_{iz}n_e$으로, ν_{iz}는 이온화 충돌 주파수이다. ν_{eN}은 전자-중성종 충돌 주파수, ν_{iN}은 이온-중성종 충돌 주파수이다. v_e는 전자 속도, v_i는 이온 속도, m_e는 전자 질량, $\mathbf{q}_e$는 열 플럭스, 그리고 M_i는 이온 질량이다. P_{ext}는 공급된 파워, P_{coll}은 충돌에 의한 파워 손실이다.

이러한 Model Ⅰ에서는 프와송 방정식의 해를 통해 전기장이 계산되므로 공간 간격과 시간 간격에 대한 제약이 매우 심하다. 1장에서 상술한 바와 같이, 공간 간격에 대한 제약은 upwind scheme, power-law scheme을 이용하여 극복할 수 있으며, 시간 간격에 대한 제약은 dielectric relaxation scheme을 이용하는 것이 가장 효율적이다. 그러나 다양한 경계 조건들에 대해서는 충분한 비교, 검토가 요구되는 상황이다.

Model Ⅰ은 다시 sheath를 포함하고 있는 모델과 sheath를 따로 모델링하는 모델로 크게 분류할 수 있고, 각각의 경우에 여러 가지 경계 조건이 적용 가능하다. 본 연구에서는 다음과 같이 가능한 경계 조건을 설정해 비교하였다. 전자 온도에 대한 경계 조건으로는 널리 받아들여지고 있는 등온 조건을 공통적으로 설정하였다.

2.1.1 Sheath를 포함하는 모델

2.1.1.1 Case 1 : 하전입자 밀도 값이 0이고 플럭스 보존을 이용하는 조건

Sheath를 포함하고 있는 경우에는, sheath 내에서 이온화를 무시할 수 있으며 이온화 평균 자유 행로에 비해 sheath 길이가 매우 작아서 경계 조건은 다음과 같이 정리될 수 있다[1, 9-12].

$$n_i=0,\ n_e=0 \tag{7}$$

$$\phi=0 \tag{8}$$

$$\frac{\partial \Gamma_i}{\partial z}=0,\ \frac{\partial \Gamma_e}{\partial z}=0 \tag{9}$$

2.1.1.2 Case 2 : 이온 밀도를 속도의 보외법으로 결정한 조건

정상 상태이고 sheath 영역에서 충돌이 없다는 가정하에서 이온 속도의 보외법을 통해 이온 밀도에 대한 경계 조건이

$$n_W=\frac{n_{W-1/2}v_{W-1/2}}{v_W},\quad n_0=\frac{n_{1/2}v_{1/2}}{v_0} \tag{10}$$

과 같이 표현될 수 있으며, 전자 밀도, 포텐셜, 플럭스 대한 경계 조건은

$$n_e=0 \tag{11}$$

$$\phi=0 \tag{12}$$

$$\frac{\partial \Gamma_i}{\partial z}=0,\ \frac{\partial \Gamma_e}{\partial z}=0 \tag{13}$$

과 같이 설정될 수 있다.

2.1.2 Sheath를 포함하지 않은 모델 (sheath를 따로 모델링)

2.1.2.1 Case 3 : Bohm sheath criterion을 기반으로 한 모델

Sheath에서 플럭스가 보존된다고 가정하며 벽에서 전자의 밀도는 sheath 전위차 만큼의 Boltzmann 인자로

$$n_{wall} = n_0 \exp\left(\frac{e\varphi_f}{T_e}\right) \tag{14}$$

이다. 여기서 n_0는 sheath 입구에서의 밀도, ϕ_f는 sheath 전위차이다. 그러므로 벽에서의 전자 플럭스는

$$\Gamma_{e,wall} = \frac{1}{4} n_0 \bar{v}_e \exp\left(\frac{e\phi_f}{T_e}\right) \tag{15}$$

이다. 그리고 Bohm sheath 모델에 의해 이온 플럭스는

$$\Gamma_{i,b} = n_0 v_B \tag{16}$$

이다[19]. 여기서 v_B는 Bohm 속도이다.

Sheath 모델은

$$\phi_f = \frac{T_e}{2e} \ln\left(\frac{M}{2\pi m_e}\right) \tag{17}$$

$$S = \frac{\sqrt{2}}{3} \lambda_D \left(\frac{2e\phi_f}{T_e}\right)^{3/4} \tag{18}$$

이다. 여기서 S는 sheath 길이, λ_D는 Debye 길이이다.

2.1.2.2 Case 4 : Bohm 모델과 다른 sheath 모델

Bohm sheath 모델과 다른 관점에서 sheath 입구에서 이온 속도에 대한 경계 조건을 다음과 같이 시도할 수 있다[3].

$$|v_b| = v_s \sqrt{1 + \left(\frac{\alpha\lambda\nu}{2v_s}\right)^2} - \frac{\alpha\lambda\nu}{2} \tag{19}$$

여기서 λ는 드바이 길이, α는 상수이며 α=1 일 경우 Godyak's sheath 모델로 귀착된다[5]. 그리고 전자 플럭스의 경계 조건은,

$$\Gamma_{e,wall} = \frac{1}{4} n_0 \bar{v}_e \exp\left(\frac{e\phi_f}{T_e}\right) \tag{20}$$

이다. 그리고 sheath 모델은

$$\phi_f = \frac{T_e}{e} \ln\left(\frac{4|v_b|}{\bar{v}_e}\right) \tag{21}$$

$$S = \frac{4}{3\sqrt{\zeta}} \left[(x_w - 2\xi)\sqrt{x_w + \xi} - (x_b - 2\xi)\sqrt{x_b + \xi}\right] \tag{22}$$

이다. 여기서 $x_b = \sqrt{Mv_b^2/2}$, $x_w = \sqrt{e\phi_f + Mv_b^2/2}$, $\zeta = 4\pi e^2 n_b v_b \sqrt{M/2}$, 그리고 $\xi = e^2 E_b^2/\zeta - x_b$다.

2.2 Model II : 준중성 조건을 가정한 pre-sheath 모델

준중성, 무질량(massless) 전자, 그리고 국부적인 쌍극성 확산(locally ambipolar diffusion)을 가정했을 때, $N \equiv n_i \cong n_e$ 이고 $v \equiv v_i \cong v_e$이다. 그러면 Model I 에서의 유체 방정식이 플라즈마 영역에서 다음과 같이 표현될 수 있다[3].

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma = R_e \tag{23}$$

$$E = -\frac{1}{eN} \frac{\partial (NT_e)}{\partial z} \tag{24}$$

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \nabla \cdot (\Gamma \mathbf{v}) = \frac{eN}{M_i} \mathbf{E} - \frac{\nabla (NT_i)}{M_i} - \nu_{iN} \Gamma \tag{25}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{3}{2} NT_e\right) + \nabla \cdot \left(\frac{3}{2} NT_e \mathbf{v}\right) + NT_e \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{q}_e = P_{ext} - P_{coll} \tag{26}$$

여기서 N은 플라즈마 밀도, Γ는 플럭스, 그리고 R_e는 $\nu_{iz} N$으로, ν_{iz}는 이온화 충돌 주파수이다. v는 플라즈마 속도, M_i은 이온 질량이다. T_i는 이온 온도이며 ν_{iN}은 이온-중성종 충돌 주파수이다. P_{abs}는 흡수된 파워, P_{coll}는 충돌에 의한 파워 손실을 나타낸다.

이 경우 준중성을 가정할 수 없는 sheath는 필연적으로 따로 계산되어야 하며, 유체 속도에 대한 경계 조건으로 Bohm 속도를 선택할 경우 Persson's criterion와 상충하여 특이점이 발생될 수 있다는 해석적인 분석을 기반으로 하는 지적이 제시 되었다[5]. 또한 이러한 문제점을 극복하기 위한 경계 조건이 다음과 같이 제시되었다.

$$\left|\frac{\partial n}{\partial z}\right| = \frac{n_b}{\lambda_b} \; or \; |E_b| = \frac{T_{e,b}}{e\lambda_b} \tag{27}$$

$$|v_b| = v_s \Big/ \sqrt{1 + \frac{\lambda_{Db}}{2\lambda_p}} \tag{28}$$

아울러 식 27과 28의 직접적인 수치 해석적 적용이 또 다른 수치 해석적 불안정성을 유발할 가능성이 지적되었으며[3], 그리고 이를 극복하기 위한 경계 조건이 다음과 같이 제시되었다.

$$\left|\frac{\partial n}{\partial z}\right| = \frac{n_b}{\alpha\lambda_b} \; or \; |E_b| = \frac{T_{e,b}}{\alpha e\lambda_b} \tag{29}$$

$$|v_b| = v_s \sqrt{1 + \left(\frac{\alpha\lambda\nu}{2v_s}\right)^2} - \frac{\alpha\lambda\nu}{2} \tag{30}$$

그러나 위의 모델들은 해석적인 분석만으로 논의되었기

때문에 upwind scheme등을 비롯한 수치 해석적 방법의 영향에 의해 실제 적용에서는 이러한 불안정성이 해소될 수 있다는 것이 본 연구에서 확인되었으며, 따라서 Persson's criterion에 위배되는 Bohm sheath 모델도 포함하여 비교 검토하였다.

2.2.1 Case 5 : Bohm sheath criterion을 기반으로 한 모델

Bohm sheath criterion을 적용한 모델로, 속도 및 플럭스는

$$\upsilon_b = \upsilon_B \tag{31}$$

$$\Gamma_b = n_b \upsilon_B \tag{32}$$

이다. 여기서 υ_B는 Bohm 속도이다.

Sheath 모델은

$$\phi_f = \frac{T_e}{2e}\ln\left(\frac{M}{2\pi m_e}\right) \tag{33}$$

$$S = \frac{\sqrt{2}}{3}\lambda_D\left(\frac{2e\phi_f}{T_e}\right)^{3/4} \tag{34}$$

이다. 여기서 S는 sheath 길이, λ_D는 Debye 길이이다.

2.2.2 Case 6 : Godyak의 sheath 모델

해석적인 분석을 통해 Bohm sheath criterion과 Persson's criterion이 서로 상충하여 특이점이 발생될 수 있다는 지적이 되었고, 이 문제를 극복하기 위한 경계 조건이 Godyak에 의해 다음과 같이 제시되었다.

$$\left|\frac{\partial n}{\partial z}\right| = \frac{n_b}{\lambda_b} \; or \; |E_b| = \frac{T_{e,b}}{e\lambda_b} \tag{35}$$

$$|\upsilon_b| = \upsilon_s \Big/ \sqrt{1+\frac{\lambda_{Db}}{2\lambda_p}} \tag{36}$$

여기서 λ_{Db}는 경계에서 Debye 길이, λ_p는 이온 평균 자유행로이다. 그리고 sheath 모델은

$$\phi_f = \frac{T_e}{e}\ln\left(\frac{4|\upsilon_b|}{\bar{\upsilon}_e}\right) \tag{37}$$

$$S = \frac{4}{3\sqrt{\zeta}}\left[(x_w - 2\xi)\sqrt{x_w+\xi} - (x_b - 2\xi)\sqrt{x_b+\xi}\right] \tag{38}$$

이다. 여기서 $x_b = \sqrt{Mv_b^2/2}$, $x_w = \sqrt{e\phi_f + Mv_b^2/2}$, $\zeta = 4\pi e^2$, $n_b\upsilon_b\sqrt{M/2}$ 그리고 $\xi = e^2E_b^2/\zeta - x_b$이다.

2.2.3 Case 7 : Yoon의 sheath 모델

Yoon에 의해 $\lambda_B/\Delta z \ll 1$ 인 조건에서, Godyak 모델의 수치 해석적 적용이 또 다른 수치 해석적 불안정성을 유발할 가능성이 지적되었다. 그리고 이를 극복하기 위한 경계조건이 Yoon에 의해 다음과 같이 제시되었다[3].

$$\left|\frac{\partial n}{\partial z}\right| = \frac{n_b}{\alpha\lambda_b} \; or \; |E_b| = \frac{T_{e,b}}{\alpha e\lambda_b} \tag{39}$$

$$|\upsilon_b| = \upsilon_s\sqrt{1+\left(\frac{\alpha\lambda\nu}{2\upsilon_s}\right)^2} - \frac{\alpha\lambda\nu}{2} \tag{40}$$

여기서 λ는 Debye 길이, $\alpha(\geq 1)$는 상수이다.

Sheath 모델은,

$$\phi_f = \frac{T_e}{e}\ln\left(\frac{4|\upsilon_b|}{\bar{\upsilon}_e}\right) \tag{41}$$

$$S = \frac{4}{3\sqrt{\zeta}}\left[(x_w - 2\xi)\sqrt{x_w+\xi} - (x_b - 2\xi)\sqrt{x_b+\xi}\right] \tag{42}$$

이다. 여기서 $x_b = \sqrt{Mv_b^2/2}$, $x_w = \sqrt{e\phi_f + Mv_b^2/2}$, $\zeta = 4\pi e^2$, $n_b\upsilon_b\sqrt{M/2}$ 그리고 $\xi = e^2E_b^2/\zeta - x_b$이다.

위에서 논의된 수송 방정식에 대한 여러 모델과 경계조건을 정리하면 표 1과 같다.

표 1 수송 방정식의 여러 모델 및 경계조건

Table 1 Various models and various boundary conditions of equations for fluid simulation

모델	경계조건	
	sheath 포함	sheath 따로 모델링
Model I	Case 1	
	Case 2	
		Case 3
		Case 4
Model II		Case 5
		Case 6
		Case 7

3. 결 과

가장 효율적인 방법은 심각한 정확도의 훼손이 없는 한 시간 간격 Δt와 공간 간격 Δz를 가능한 한 큰 값으로 적용할 수 있는 모델일 것이다. 1절에서는 Model I 의 Case

1-4를 비교했고 2절에서는 Model II의 Case 5-7, 그리고 3절에서는 Model I과 Model II를 비교했다. 시뮬레이션은 평판형 유도 결합 플라즈마원의 Ar 플라즈마 방전에 대한 1차원 모델링(그림 1)을 통해 2장에 제시된 여러 모델 및 경계조건에서 이루어졌다. 챔버의 반경 R은 0.15 m, 챔버의 길이 L은 0.1 m이다.

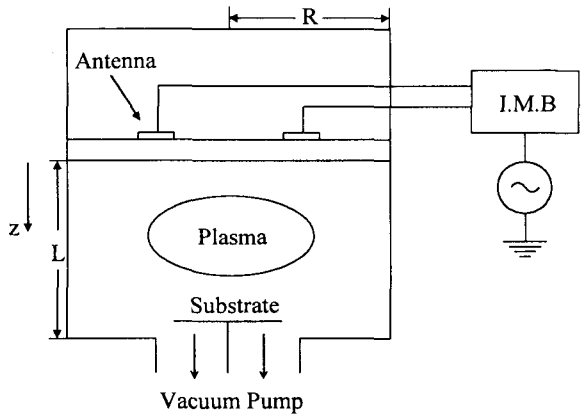


그림 1. 평판형 유도결합 플라즈마원의 개략도
Fig. 1 Schematic diagram of a TCP device

이온화 충돌 주파수는 $\nu_{iz}=K_{iz}n_N$ [8]이며, 여기서 n_N은 중성종 밀도, δ는 skin depth이다. 이온-중성종 충돌 주파수는 $\nu_{iN}=\sigma_{iN}\upsilon(T_e)n_N$이며, $\sigma_{iN}=50\times10^{-20}\ m^2$, $\upsilon(T_e)=\sqrt{8kT_i/\pi M_i}$이다. 전자-중성종 충돌 주파수 및 운동량 전달 비율 계수는,

$$\nu_{eN}=\sum n_e\int f_e(\upsilon)\upsilon\sigma_{eN}^m(\upsilon)d^3\upsilon=n_e k_{Ar}(T_e) \tag{43}$$

$$k_{Ar}(T_e)=\begin{cases}\left(\begin{matrix}2.2037+7.6037T_e+21.1688T_e^2\\-4.0168T_e^2+0.2387T_e^4\end{matrix}\right)\times10^{-9} & (T_e<6\ eV)\\ \left(\begin{matrix}8.3021+3.5142T_e-0.1361T_e^2\\+0.002554T_e^3+0.0000179T_e^4\end{matrix}\right)\times10^{-8} & (6\ eV\le T_e<50\ eV)\\ (3.9957+0.0226T_e)\times10^{-7} & (T_e\ge50\ eV)\end{cases} \tag{44}$$

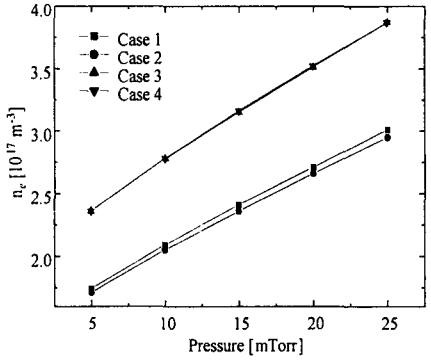
이다. 흡수된 파워의 공간 의존성은 skin depth에 의해 $P_{abs}\approx P_0\exp(-2z/\delta)$와 같다고 가정하고 입력 고주파 파워 P_{RF}로 규격화하면 흡수된 파워 밀도는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$P_{abs}(z)=\frac{2P_{RF}}{\delta[1-\exp(-2L/\delta)]S}\exp(-2z/\delta) \tag{45}$$

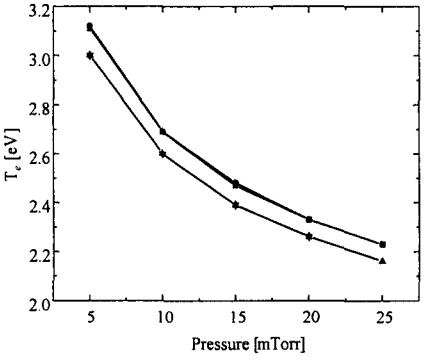
여기서 S는 단면적이다.

3.1 Model I 비교

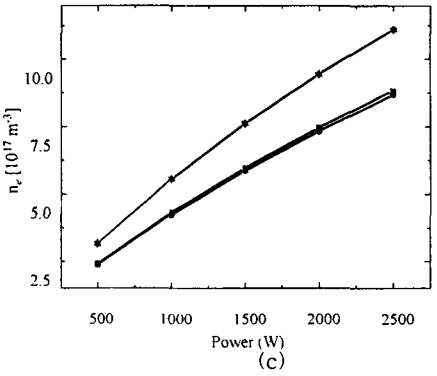
그림 2에서, (a),(b),(d)는 파워 500 W, 정상 상태에서 공간 평균한 전자 밀도와 온도, 그리고 포텐셜 최대 값의 압력 의존성이다. (c)는 압력 15 mTorr에서 공간 평균한 전자 밀도의 파워 의존성이다. Case 1과 Case 2는 전자 밀도와 온도는 거의 일치하는 파워 및 압력 의존성을 보여주고 있다. 그러나 Case 1은 공간에서 포텐셜의 최대 값이 Case 2와는 13%, Case 3,4와는 대략 두 배에 달하는 차이를 보이고 있다. Case 3과 Case 4의 압력과 파워 의존성은 거의 일치하고 있다. 그리고 sheath를 포함하는 모델 Case 1,2와 포함하지 않는 모델 Case 3,4 간의 차이가, 밀도는 36 % 이내, 전자 온도는 4 % 이내에 있다.



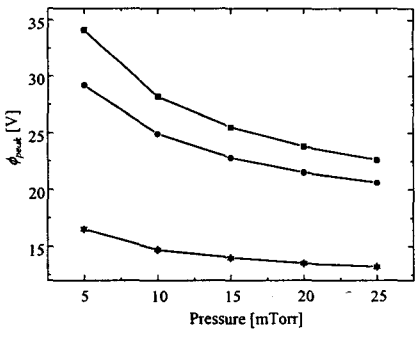
(a)



(b)



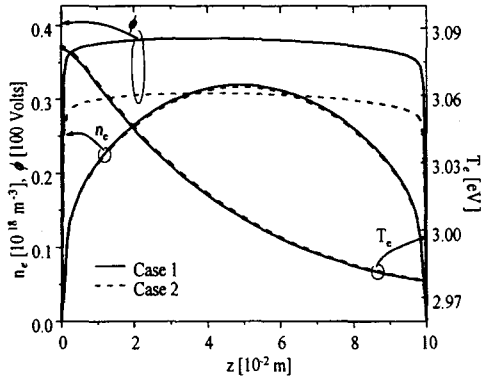
(c)



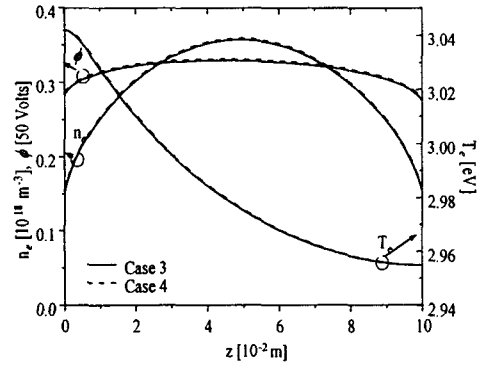
(d)

그림 2. Case 1-4에서 (a) 공간 평균한 전자 밀도의 압력 의존성, (b) 공간 평균한 전자 온도의 압력 의존성 (c) 공간 평균한 전자 밀도의 파워 의존성, (d) 공간에서 포텐셜 최대 값의 압력 의존성

Fig. 2 At Case 1-4: (a) Averaged electron density at various pressures, (b) averaged electron temperature at various pressures, (c) averaged electron density at various powers, (d) peak values of potential at various pressures



(a)

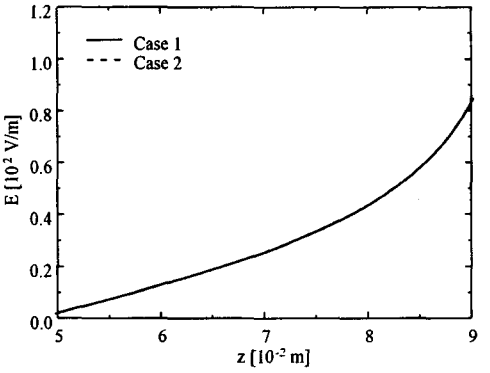


(b)

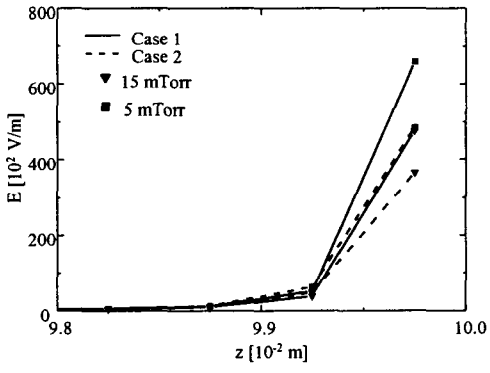
그림 3. 여러 경계 조건에 대한 플라즈마 변수의 공간 의존성(그리드 120개, dt=1×10-10 s) : (a) Case 1 & Case 2, (b) Case 3 & Case 4, 정상 상태가 되는 순간의 시간 : Case 1 = 1.217×102 sec, Case 2 = 1.161×102 sec, Case 3 = 1.340×102 sec, Case 4 = 1.344×102 sec

Fig. 3 Plasma parameters with various boundary conditions (grid 120 N, dt=1×10-10 s): (a) Case 1 & Case 2, (b) Case 3 & Case 4, time for steady state: Case 1 = 1.217×102 sec, Case 2 = 1.161×102 sec, Case 3 = 1.340×102 sec, Case 4 = 1.344×102 sec

그림 3은 파워 500 W, 압력 5 mTorr에서 여러 경계조건에 대한 플라즈마 변수의 공간 의존성으로, (a)는 sheath를 포함하는 두 모델로, 전자 밀도, 전자 온도는 비슷한 공간 의존성을 보여주고 있으며, 포텐셜은 밀도에 대한 경계조건 차이 때문에 포텐셜의 크기가 16 % 이내의 차이를 보이고 있다. (b)는 sheath를 따로 모델링한 경우로 전자 밀도, 포텐셜, 그리고 전자 온도의 공간 의존성이 거의 일치함을 알 수 있다. 정상 상태가 되는 순간의 시간은 거의 비슷하지만, 안정된 시뮬레이션을 가능케 하는 시간 간격 Δt는 경계조건에 따라 차이가 있다. 예를 들어, 30 개의 그리드일 때, Case 1,2는 10^{-8} s, Case 3,4는 10^{-9} s까지 안정적인 결과를 얻을 수 있었다. 따라서 Case 1,2는 Case 3,4 보다 약 10 배 정도 더 빠른 안정적인 계산이 가능한 것으로 확인되었다. 이러한 결과에 대한 직접적인 원인은 현재로서는 파악되지 않았으며 다양한 수치 해석적 방법들의 종합적인 영향에 의한 것으로 추측된다.



(a)



(b)

그림 4. 압력에 대한 전기장의 공간 의존성 : (a) Case 1 & Case 2의 5 mTorr 압력에 대한 전기장의 공간 의존성(플라즈마 영역), (b) Case 1 & Case 2의 5, 15 mTorr 압력에 대한 전기장의 공간 의존성(경계 근처)

Fig. 4 Electric field profiles at various pressure: (a) Case 1 & Case 2 of 5 mTorr(plasma regions), (b) Case 1 & Case 2 of 5, 15 mTorr(boundary regions)

그림 4의 (a)는 Case 1,2의 5 mTorr 압력에 대한 전기장의 공간 의존성을 플라즈마 영역에서 계산한 결과로 서로

잘 일치하는 의존성을 보이고 있다. (b)는 Case 1,2의 5 mTorr와 15 mTorr 압력에 대한 전기장의 공간 의존성이다. 이온 밀도에 대한 경계 조건의 차이 때문에 경계 근처에서만 전기장의 세기의 차이를 보이고 있다는 것을 알 수 있다.

그림 5는 압력 5 mTorr, 파워 500 W에서 고정된 공간 간격에 대해 최대로 크게 할 수 있는 시간 간격을 보인 것으로, Case 1이 다른 조건에 비해 가장 효율적으로 시뮬레이션이 가능한 모델임을 확인 할 수 있다.

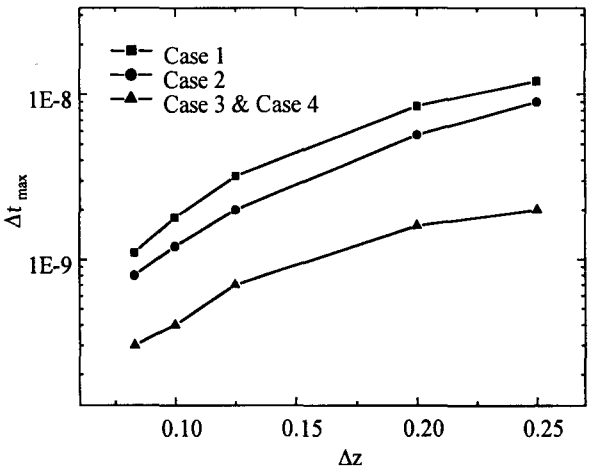


그림 5. 여러 경계 조건에서 Δz에 대한 Δtmax 의존성
Fig. 5 Δtmax vs Δz at various boundary conditions

이 절에서는 sheath를 포함한 Case 1,2와 sheath를 따로 모델링한 Case 3,4를 비교해 보았다. Case 1의 경계 조건이 다른 모델에 비해 Δt를 가장 크게 할 수 있는 효율적인 모델이지만, 한편으로 Case 1의 경계 조건은 Case 3,4의 모델과 비교했을 때, 포텐셜 분포의 정확성에서 차이가 있다. 그리고 Case 2에서 이용된 이온 밀도의 경계 조건이 Case 1의 조건보다 현실적인 경계 조건으로 판단된다. 또한 Case 2의 모델은 Case 3,4의 모델과 정확성 면에서 비슷한 경향성을 보이면서도 효율적인 계산을 수행할 수 있는 것으로 확인되었다.

3.2 Model II 비교

표 2 여러 압력에 대한 공간 평균한 전자 온도(eV)
Table 2 Averaged electron temperature for 500 W at various pressures(eV)

	5 mTorr	10 mTorr	20 mTorr
Case 5	3.00	2.60	2.26
Case 6	3.00	2.60	2.26
Case 7	3.00	2.60	2.26

표 2,3은 파워 500 W에서 여러 압력에 대하여 전자 밀도 및 온도의 공간 평균값이다. 그리고 표 4는 압력 5 mTorr에서, 여러 파워에 대하여 전자 밀도의 공간 평균한 값이다. Case 5,6과 Case 7(α=1) 모델에서 정확성 면에서 거의 일치하는 경향성을 보이고 있다.

표 3 여러 압력에 대한 공간 평균한 전자 밀도($\times 10^{17}$ m^{-3})
Table 3 Averaged electron density for 500 W at various pressures($\times 10^{17}$ m^{-3})

	5 mTorr	10 mTorr	20 mTorr
Case 5	2.37	2.79	3.54
Case 6	2.36	2.79	3.54
Case 7	2.37	2.79	3.54

표 4 여러 파워에 대한 공간 평균한 전자 밀도($\times 10^{17}$ m^{-3})
Table 4 Averaged electron density for 5 mTorr at various powers($\times 10^{17}$ m^{-3})

	500 W	1 kW	2 kW
Case 5	2.37	4.24	7.31
Case 6	2.36	4.24	7.31
Case 7	2.37	4.24	7.31

표 5는 파워 500 W, 압력 5 mTorr일 때, Case 7에서 여러 α값에 대하여 전자 밀도 및 온도를 공간 평균한 값을 보인 것이다. α가 1보다 클 경우는 표 2,3의 결과와 비교했을 때 다른 모델들과 차이가 커짐을 알 수 있다. 그림 6은 Case 7에서 파워 500 W, 압력 5 mTorr일 때, 여러 α에 대한 플라즈마 밀도 및 전자 온도의 공간 의존성으로 α값이 커짐에 따라 차이가 증가함을 알 수 있다.

표 5 Case 7에서 여러 α에 대한 공간 평균한 전자 밀도 및 전자 온도
Table 5 At Case 7: averaged electron density and electron temperature at various α

	1	10	100	500
n_p ($\times 10^{17}$ cm^{-3})	2.37	2.37	2.40	2.52
T_e (eV)	3.00	3.00	3.00	2.96

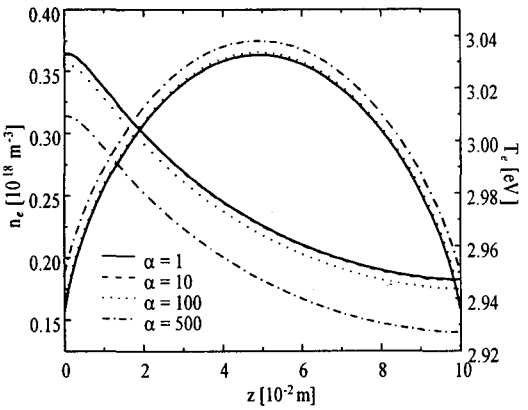


그림 6. Case 7에서 여러 α에 대한 플라즈마 밀도 및 전자 온도의 공간 의존성

Fig. 6 At Case 7: plasma density, electron temperature profiles at various α

Sheath 입구에서의 포텐셜 값의 크기가 각 경계 조건에서 거의 일치했다. 그 이유로 생각할 수 있는 것은, sheath 입구에서의 속도가 Bohm 속도와 비슷하기 때문인 것으로 추측할 수 있다. Godyak은 Case 5의 경우에 Persson's criterion과 상충하여 특이점이 발생될 수 있다는 지적을 하였고, 이러한 문제를 극복하기 위한 경계 조건(Case 6)을 제시하였다. 하지만 Godyak이 제시했던 경계 조건 또한 $\lambda_B/\Delta z \ll 1$인 경우 수치 해석적 불안정성이 유발될 수 있다는 가능성이 Yoon에 의해 지적되었고, 그리고 이를 극복하기 위한 경계 조건(Case 7)도 제시되었다. 그러나 이러한 분석은 불안정성을 극복하기 위해 도입되는 다양한 수치 해석적인 방법들의 영향이 배제된 해석 식만으로 도출된 분석 결과에 의존하고 있다.

Upwind scheme[20], power-law scheme[20] 등을 이용한 본 연구에서는 Case 7을 포함한 Case 5,6에서도 안정적인 해를 얻을 수 있었다. 이에 대한 원인은 유한 차분식 형태를 다음과 같이 분석함으로서 찾을 수 있을 것이다. 식 25의 운동 방정식에서 upwind scheme과 power-law scheme을 이용해 첫 번째 그리드에서 속도를 유한 차분식으로 정리하면 아래와 같다.

$$\upsilon_{1/2}^{new} = \frac{1}{n_{1/2}^{new}}\left[\upsilon_{1/2}^{old} - \nu_{iN,1/2}\Delta t\left(n_{1/2}^{old}\upsilon_{1/2}^{old} - A_{1/2}\right) - \Delta t B_{1/2}\right] \tag{46}$$

$$A_{1/2} = \frac{T_{i,1/2}}{\Delta z M_i \nu_{iN,1/2}}\left(a(P_i)N_k - b(P_i)N_{k+1}\right), \quad P_i = \frac{eE_{1/2}\Delta z}{T_{i,1/2}} \tag{47}$$

$$a(P_i) = Max\left[0,\left(1-0.1|P_i|^5\right)\right] + Max\left[-P_i,0\right] \tag{48}$$

$$b(P_i) = Max\left[0,\left(1-0.1|P_i|^5\right)\right] + Max\left[P_i,0\right] \tag{49}$$

$$B_{1/2} = \frac{\Gamma_{3/2}\upsilon_{3/2} - \Gamma_{1/2}\upsilon_{1/2}}{\Delta z} \tag{50}$$

식 50의 대류항이 유동의 방향이 고려되어 상류쪽 그리드에서의 값으로 택해졌기 때문에 경계 조건이 Bohm 속도가 되어도 실제의 수치적인 식에서는 안정적인 계산이 가능함을 알 수 있다.

2절에서는 준중성 상태를 가정하고 sheath를 따로 모델링한 Case 5-7의 모델을 비교해 보았다. 모든 경계 조건이 0.3 % 이내의 비슷한 의존성을 보였으며, 시간 간격 Δt는 30개의 그리드에서 10^{-7} s에서도 안정적인 계산이 가능한 것을 확인하였다. 특히 Case 5,6의 경계 조건을 적용해도 upwind scheme을 이용하면 안정적인 수치 해석적 해를 얻을 수 있음을 확인하였다. 모든 조건이 정확성, 안정성, 효율성 면에서 비슷하지만, Case 5의 조건이 Case 6,7의 경계 조건에 비해 간단하다. 따라서 Case 5의 모델이 가장 간단하면서도 효율적인 모델임을 확인하였다.

3.3 Model Ⅰ, Ⅱ 비교

그림 7은 Model Ⅰ에서의 경계 조건과 Model Ⅱ에서의 조건을 비교한 결과이다. (a)의 Case 2,5의 비교에서는, 전자 온도는 2 % 이내, 플라즈마 밀도는 17 % 이내의 차이를 보이고 있다. 포텐셜의 의존성을 비슷하지만 값의 차이가 있음을 알 수 있다. (b)의 Case 3,5는, sheath를 따로 모델링한 두 모델로 모든 플라즈마 변수들이 1 % 이내의 의존성을 보인다.

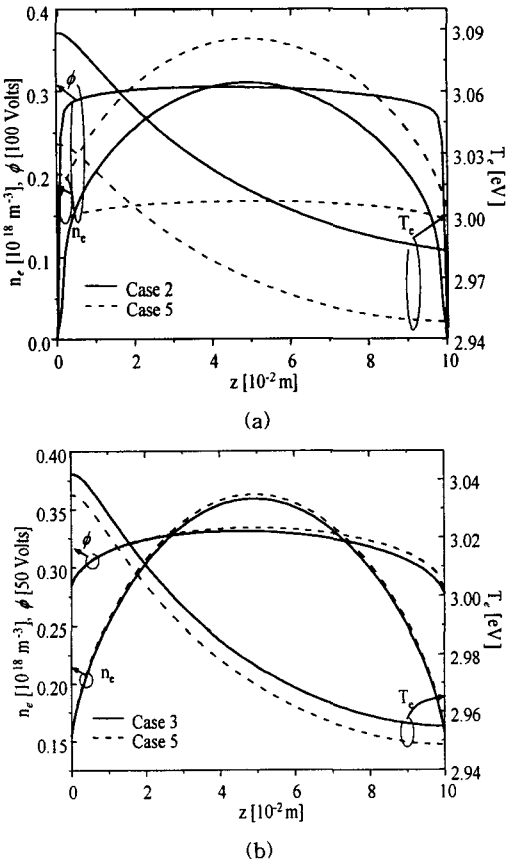


그림 7. 여러 경계 조건에 대한 플라즈마 변수의 공간 의존성: (a) Case 2 & Case 5, (b) Case 3 & Case 5

Fig. 7 Plasma parameters profiles at various boundary conditions: (a) Case 2 & Case 5, (b) Case 3 & Case 5

안정된 시뮬레이션을 가능케 하는 시간 간격 Δt는 거의 일치하는 의존성을 보였다. 30 개의 그리드일 때, Case 5-7의 모든 경계 조건에서 시간 간격이 10^{-7} s 까지 안정적인 결과를 얻을 수 있는 것으로 확인되었다.

Model Ⅰ과 Ⅱ의 비교 결과는 준중성 pre-sheath 모델인 Model Ⅱ가 더 효율적이라는 것을 보여준다. 그리고 비교된 경계 조건 중에서는 Case 5의 모델이 가장 안정적이면서도 효율적인 모델임이 확인되었다. 만약 sheath를 포함해야 하는 경우라면 Case 2의 모델이 가장 적합한 것으로 확인되었다.

4. 결 론

고밀도 유도결합 플라즈마원 유체 수송 시뮬레이션을 위해 제시된 다양한 경계 조건을 포함한 여러 가지 모델들이 1차원 시뮬레이션을 통해 정확성과 수치 해석적 안정성 및 효율성 면에서 비교, 검토되었다.

일반적으로 준중성 pre-sheath 모델이 준중성을 가정하지 않은 모델보다 효율적이라는 것이 확인되었다. 이러한 준중성을 가정한 pre-sheath 모델에서는, 다음과 같은 경계 조건이 가장 적합한 것으로 판단된다.

$$\upsilon_b = \upsilon_B \tag{51}$$

$$\Gamma_b = n_b \upsilon_B \tag{52}$$

$$\phi_f = \frac{T_e}{2e} \ln\left(\frac{M}{2\pi m_e}\right) \tag{53}$$

만일 불가피하게 sheath를 포함해야 할 경우라면 아래의 Case 2의 경계 조건이 가장 적절하다는 것이 확인되었다.

$$n_W = \frac{n_{W-1/2}\upsilon_{W-1/2}}{\upsilon_W}, \quad n_0 = \frac{n_{1/2}\upsilon_{1/2}}{\upsilon_0} \tag{54}$$

$$n_e = 0 \tag{55}$$

$$\phi = 0 \tag{56}$$

$$\frac{\partial \Gamma_i}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial \Gamma_e}{\partial z} = 0 \tag{57}$$

본 연구에서는 음이온이 포함되지 않은 단순 플라즈마에 대한 시뮬레이션을 통해 비교 검토하였지만, 음이온이 포함되는 복합 가스 방전에 대해서도 일반 sheath 모델이 적용된다면 크게 다르지 않은 결과를 보일 것으로 예상된다. 아울러 음이온이 포함된 경우의 최적 경계 조건을 정립하는 연구가 현재 진행되고 있다.

참 고 문 헌

[1] H. H. Choe, N. S. Yoon, S. S. Kim and D. I. Choi, "A New Unconditionally Stable Algorithm for Steady State Fluid Simulation of High Density Plasma Discharge", Journal of Computational Physics 170, 550-561 (2001).

[2] T. E. Nitschke and D. B. Graves, "A comparison of particle in cell and fluid model simulations of low-pressure radio frequency discharges", J. Appl. Phys. 76, 5646 (1994).

[3] N. S. Yoon, N. H. Choi, B. H. Park, and D. I. Choi, "One-Dimensional Fluid Model of ECR Discharge with Inhogeneity Effects of External Magnetic Field", IEEE Trans. Plasma. Sci. 23, 609 (1995)

[4] S. S. Kim, N. S. Yoon, and C. S. Chang, "A One-dimensional Model for a TCP discharge including the collisionless electron heating mechanism", J. Korean Phys. Soc. 29, 678 (1996).

[5] V. A. Godyak and N. Sternberg, "Smooth plasma-sheath transition in a hydrodynamic model", IEEE Trans. Plasma Sci, 18, 159 (1990).

[6] S. S. Kim, S. Hamaguchi, N. S. Yoon, C. S. Chang, Y. D. Lee and S. H. Ku, "Numerical Investigation on Plasma and Poly-Si Etching Uniformly Control over Large Area with a Modified Inductively Coupled Plasma Source", Physics of Plasmas, 8, 1384 (2001).

[7] S. K. Park and D. J. Economou, "Analysis of low pressure rf glow discharges using a continuum model", J. Appl. Phys. 68(8), 3904 (1990).

[8] J. D. Bukowski, D. B. Graves and P. Vitello, "Two-dimensional fluid model of an inductively coupled plasma with comparison to experimental spatial profiles", J. Appl. Phys. 80 (5) (1996).

[9] H. H. Choe, N. S. Yoon, "The Effect of Inertial Terms in the Momentum Equation in Fluid Simulation of High Density Plasma Discharge", J. of Korean Phys. Soc. vol. 42, s859-s866 (2003).

[10] R. A. Stewart, P. Vitello, D. B. Graves, E. F. Jaeger and L. A. Berry, "Plasma uniformity in high-density inductively coupled plasma tools", Plasma Sources Sci. Technol. 4, 36 (1995).

[11] R. A. Stewart, P. Vitello, and D. B. Graves, "Two-dimensional fluid model of high density inductively coupled plasma sources", J. Vac. Sci. Technol. B 12(1), 478 (1994).

[12] Ming Li, Han-Ming Wu, and Yunming Chen, "Two-Dimensional Simulation of Inductively Plasma Sources with Self-Consistent Power Deposition", IEEE Trans. Plasma Sci. 23, 558 (1995).

[13] T. J. Sommerer and M. J. Kushner, "Numerical investigation of the kinetics and chemistry of rf glow discharge plasmas sustained in He, N_2, O_2, $He/N_2/O_2$, $He/CF_4/O_2$, and SiH_4/NH_3 using a Monte Carlo-fluid hybrid model", J. Appl. Phys. 71, 1654 (1992).

[14] J. P. Boeuf and L. C. Pitchford, "Pseudospark discharges via computer simulation", IEEE Trans. Plasma Sci. 19, 286 (1991).

[15] N. H. Choi, W. H. Koh, N. S. Yoon, H. B. Park, and D. I. Choi, "One-Dimensional Hybrid Modeling and simulation of Eectron Cyclotron Resonance Discharge", IEEE Trans. Plasma Sci. 23, 617 (1995).
[16] D. Bohm, Characteristics of Electrical Discharges in Magnetic Field, McGraw-Hill, p. 77, 1949.
[17] K. -B. Persson, Phys. Fluids, vol. 5, p. 1625 (1962)
[18] 최덕인, 플라즈마 물리학과 핵융합, 민음사, pp. 69-79, 1985.
[19] Michael A. Lieberman, Allan J. Lichtenberg, Principles of Plasma Discharges and Materials Processing, Wiley, pp, 154-163, 1994.
[20] S. V. Patanker, Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, McGraw-Hill, pp. 83-95, 1980.

감사의 글

본 연구는 과학재단 특정 연구개발 과제인 진공기술기반 구축 사업의 지원으로 이루어진 연구로서, 관계부처에 감사 드립니다.

저 자 소 개

권 득 철 (權 得 哲)

1977년 3월 8일생. 2004년 충북대학교 전기공학과 졸업(학사). 2004년~현재 동 대학원 전기공학과 석사과정

Tel : 054-673-3532, Fax : 043-263-2419

E-mail : dooltough@hotmail.com

윤 남 식 (尹 南 植)

1966년 3월 10일생. 1990년 서강대 물리학과 졸업(학사). 1996년 한국과학기술원 대학원 졸업(박사). 현재 충북대학교 전기전자컴퓨터공학부 부교수.

Tel :043-261-2420, Fax : 043-263-2419

E-mail : nsyoon@chungbuk.ac.kr

김 정 형 (金 貞 衡)

1967년 3월 13일생. 1990년 KAIST 물리학과 졸업(학사). 1992년 KAIST 물리학과 졸업(석사). 1996년 KAIST 물리학과 졸업(박사). 현재 한국표준과학연구원 물리표준부 진공센터 연구원

Tel : 042-868-5644, Fax : 042-868-5285

E-mail : jhkim86@kriss.re.kr

신 용 현 (申 容 賢)

1961년 3월 9일생. 1983년 연세대 물리학과 졸업(학사). 1985년 연세대 물리학과 졸업(석사). 1999년 충남대 물리학과 졸업(박사). 현재 한국표준과학연구원 책임연구원, 진공기술센터장

Tel : 042-868-5124, Fax : 042-868-5285

E-mail : yhshin@kriss.re.kr