

전자 Swarm법에 의한 SiH₄ 플라즈마의 전자이동속도 및 특성에너지 해석

12-1-13

The Analysis of the Electron Drift Velocity and Characteristics Energy in SiH₄ Plasma gas by Electron Swarm method

이형운*, 백승권**, 하성철*

(Hyoung-Yoon Lee, Seung-Kwon Paek, Sung-Chul Ha)

Abstract

This paper describes the electron transport characteristics in SiH₄ gas calculated for the range of E/N:0.5~300(Td) and Pressure:0.5, 1, 2.5(Torr) by the Monte carlo simulation and Boltzmann equation method using a set of electron collision cross sections determined by the reported results. The motion has been calculated to give swarm parameters for the electron drift velocity, longitudinal and transverse diffusion coefficients, the electron ionization coefficients, characteristics energy and the electron energy distribution function. The electron energy distributions function has been analysed in SiH₄ 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 Monte carlo simulation and Boltzmann equation have been compared with experimental data by ohmori and Pollock.

Key Words(중요속어) : Monte carlo simulation(몬테칼로시뮬레이션), Boltzmann equation(볼츠만방정식)
Electron energy distributions function(전자에너지분포함수)

1. 서 론

최근에 각종 기체 플라즈마를 사용한 반도체 제조 프로세싱기술이 많이 사용되고 있다. 그 중에서도 SiH₄(monosilane)가스는 플라즈마 CVD (Chemical Vapor Deposition)에 의한 Silicon 박막형성, 액정구동용 박막트랜지스터, 초LSI용 절연막, 기능성 박막의 생성등 공업적으로 이용되고 있으며 아울러 라디오파(Radio Wave) 및 마이크로파(Micro Wave) 전계로 여기시켜 전자와 SiH₄ 분자와의 충돌로 SiH₄ 분자의 해리반응을 거쳐 수소화 비정질실리콘(a-SiH)을 제조할 때 원료가스로 이용된다.^[1,2,3]

그러므로 폭넓은 분야에 활용되는 SiH₄가스의 전자군의 성질을 규명하는 것은 매우 중요하다고 할 수 있다. 전자군 파라미터 특성으로는 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 RF플라즈마에서는 전자온도와 이온화분자와의 현저한 온도차가 있으며 박막 퇴적 및 에칭에 필요한 Radical 등 1차적 전자 충돌에 의하여 생성되는 특성으로서 정확히 구하는 것이 중요하다. 전자의 평균에너지는 전자분포함수의 해석을 더욱 명확히 하는 중요한 데이터로 활용된다. 이와 같은 하전입자군의 파라미터, 원자분자의 충돌단면적, 반응속도등 기초 물리량의 이론적 해석과 예측은 공업적 응용에 선행되어야 하는 중요한 데이터로서

* : 동국대학교 공대 전기공학과
(서울시 중구 필동 3가, Fax: 02-705-6208
E-mail : buddy25@cakra.dongguk.ac.kr)

** : 인제대학교 공대 전자공학과
1998년 5월 12일 접수, 1999년 1월 14일 심사완료

그 의미가 매우 크다고 할 수 있다.

본 연구에서는 전자의 비평형상태에서 SiH_4 가스의 충돌단면적(q_m, q_v, q_a, q_i, q_o 등)을 Haller^[9], Tossell^[12] 등이 결정한 값을 이용하여 $E/N : 0.5 \sim 300(\text{Td})$ [E : 전계, N : 기체분자수밀도, $1\text{Td}=1 \times 10^{-17} \text{ V} \cdot \text{cm}^2$, $N : 3.5353 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 0°C 1 Torr에 해당]와 압력 $P_0 : 0.5, 1, 2.5(\text{Torr})$ 범위에서 비등방성 산란을 고려하여 계산하고 그 결과를 Pollock^[4], Ohmori^[13], Cottell and Walker^[5]의 실험값과 비교하여 전자수송특성을 고찰하였다. 그리고 전자충돌단면적의 타당성에 대하여 검토하고 평균 에너지에 따른 전자에너지분포함수를 볼츠만방정식에 의한 펄스타운젠트(Pulse Townsend), 비행시간(Time of Flight), 정상타운젠트(Steady State Townsend)의 전자 Swarm^[6]과 몬테카를로 시뮬레이션으로 계산한 전자군파라미터를 해석하였다.

2. 해석방법

기체중에서 운동하고 있는 하전입자군의 수송계수를 해석하는 방법에는 비행시간법(Time of Flight method), 펄스 타운젠트법(Pulse Townsend method) 및 정상 상태 타운젠트법(Steady State Townsend method)등이 있다. 펄스 타운젠트법은 하전입자군의 성질을 구성입자의 위치에 관계없이 시간만의 함수로서 파악하는 것이며 정상 상태 타운젠트법은 평행평판 간극의 외부에서 음극에 자외선을 조사하는 방법에 의하여 연속적으로 초기전자를 공급하여 간극 내에서 정상입자류를 형성시킨 후 간극길이만의 함수로서 하전입자군의 수송계수를 관측하는 방법이다. 한편 비행 시간법은 하전입자군의 성장률 위치, 시간의 함수로서 파악하는 관측법으로 입자수 비보존의 경우에도 하전입자군의 성질을 정확하게 구할 수 있는 장점을 가지고 있다. 본 논문에서는 전자군을 구성하는 전체의 전자를 해석하기 위해서는 전자를 수천회(5000회) 추적하는 것으로 설정하였다. 또한 기체의 종류, 압력, 밀도, 각종 충돌단면적, 전계, 전자수로 기체분자와의 충돌을 반복하면서 전자사태를 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 $\Delta l = \lambda/10$ (λ :평균자유행정)^[6,7,8] 으로 하여 전자군파라미터를 MCS법으로 계산한다.

그리고 볼츠만법을 Philip . E . Luft Backward prolongation program^[9]에 의해 전자에너지 분포함수를 $\int_0^\infty \epsilon^{1/2} f(\epsilon) d\epsilon = 1$ 의 관계식으로부터 구한 $f(\epsilon)$ 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. 전자Swarm법

전자Swarm법은 에너지분포의 영역이 넓은 전자군과 표적입자군과의 충돌현상의 평균값으로 나타나는 전자이동속도, 확산, 전리계수, 특성에너지 등의 전자수송계수를 관측하는 법이다. 전자Swarm법에서는 보다 간단한 방법으로 전자충돌단면적을 결정할 수 있다는 이점이 있으며 SiH_4 가스중에서의 플라즈마의 기본적 특성, 즉 SiH_4 분자와 전자와의 저 에너지 영역에 있어서 기초적인 전자군 파라미터를 측정한다.

4. 전자충돌단면적

본 연구에 이용한 SiH_4 의 전자충돌단면적은 Haller^[9], Tossell^[12]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.

본 연구에 이용한 SiH_4 의 전자충돌단면적은 운동량 변환단면적(Q_m), 진동 여기단면적(Q_{v13}, Q_{v24}), 전자 부착단면적(Q_a), 해리단면적(Q_d) 및 전리단면적(Q_i)등으로 구성되어 있다. 예칭가스로는 여러단면적중에 여기단면적(Q_{ex})과 해리단면적(Q_d)이 중요하고 증착가스로는 여러 단면적중에 전리단면적(Q_i)과 부착단면적(Q_a)이 중요하다.^[10,11] 각 단면적의 threshold값은 진동 여기단면적(Q_{v13}, Q_{v24})이 각각

0.271(eV), 0.113(eV)이며 부착단면적은 (Q_a)은 7.1(eV), 해리단면적(Q_d)은 8.37(eV) 이고 전리단면적(Q_i)은 12(eV)이다.

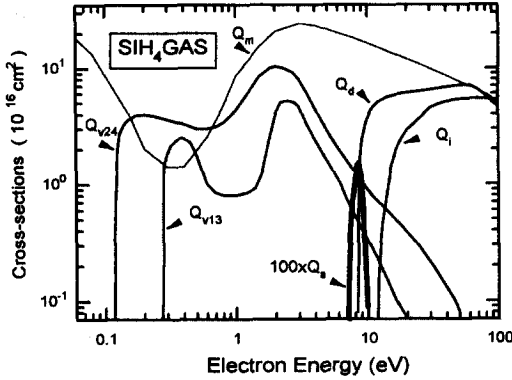


그림 1. SiH4 가스의 전자충돌단면적
Fig. 1. Collision cross section of electrons in SiH4 gas

5. 해석결과 및 고찰

5.1 전하이동속도

전자와 SiH4 분자와의 저 에너지 영역에 있어서의 비탄성충돌이 그림2에 나타난 전하이동속도에 매우 큰 영향을 준다고 여겨진다.^[10]

그림1에서 SiH4 가스의 운동량변환단면적(Q_m)은 0.3~2.5(eV)부근에 넓은 Ramsauer minimum^[1, 10]과 여기에 커다란 진동 여기단면적이 존재하므로 진동여기충돌에 의해서 낮은 에너지대의 전자가 많기 때문에 전자에너지의 커다란 순환이 발생하고 완화시간의 감소로 각각의 압력 P에 따른 E/N : 15~80(Td) 영역에서 전계 E/N이 증가함에 따라 전하이동속도가 감소하는 현상 즉 부구배전도도(NDC : Negative Differential Conductivity)의 특성을 나타내었다.

5.2 전리계수

그림3에서 나타난 전리계수는 Osmar^[11]의 실험값과 비교한 data로서 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. 또한 본 연구에서는 60(Td)이하에서는 전리가 일어나

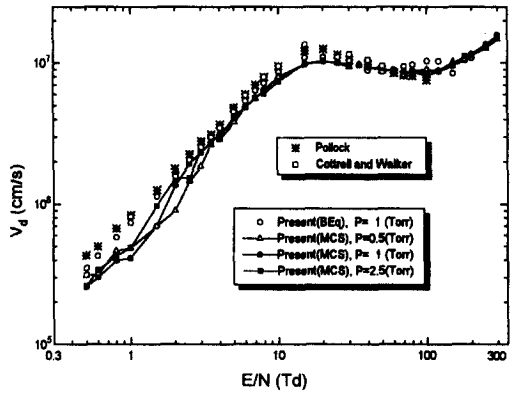


그림 2. SiH4가스에서 전하이동속도
Fig. 2. Drift velocity of electrons in SiH4 gas.

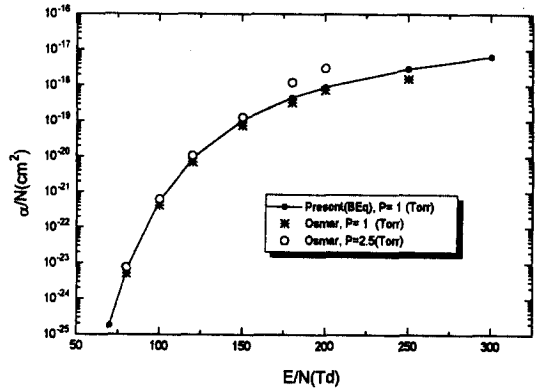


그림 3. SiH4가스에서 전리계수
Fig. 3. Ionization coefficients in SiH4 gas

지 않았다. 그리고 압력이 1(Torr) 일 때는 계산값과 실험값이 거의 일치하였으나 압력과 E/N:150(Td)이상에서는 전리계수와 압력은 상호의존성이 나타남을 확인할 수 있었다. 이것은 기체압력의 증가에 수반되는 진동여기상태에 있는 SiH4 분자의 밀도가 증가에 기인하는 것으로 알려져 있다.^[6]

5.3 종 · 횡방향 확산계수

그림4에서 알 수 있듯이 종방향확산계수(ND_L)에 있어서 E/N이 증가함에 따라 그 값이 감소하는 영역이 있다. E/N : 15~80(Td)에서 나타내는데 이 영역은 이동속도가 Negative Differential Con-

ductivity을 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.

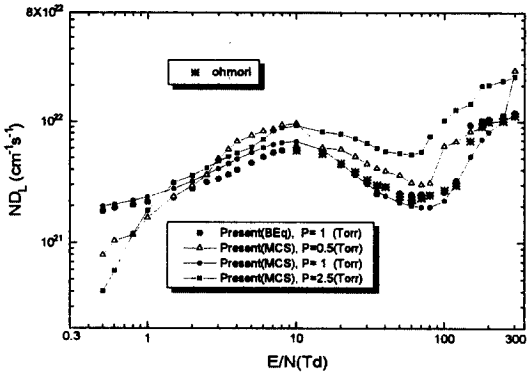


그림 4. SiH₄가스에서 종방향확산계수
Fig. 4. Longitudinal diffusion coefficients in SiH₄ gas

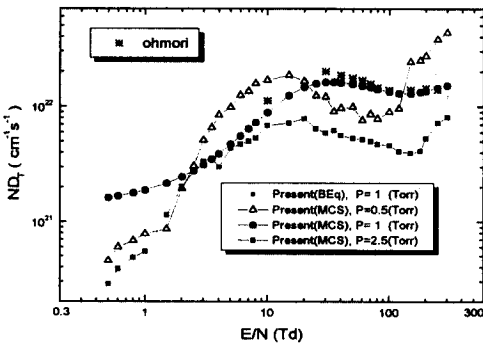


그림 5. SiH₄가스에서 횡방향확산계수
Fig. 5. Transverse diffusion coefficients in SiH₄ gas

횡방향 확산계수(ND_T)는 그림5에서 MCS 계산값과 Ohmori^[13]의 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 minimum^[1, 10]을 가지고 있는 가스들의 독특한 특징으로 여겨진다.

5.4 특성에너지

그림6에 나타난 종방향 특성에너지(D_L/μ)는 E/N : 1.5~60(Td) 영역에서는 Pollock^[4]과 Gar scadden et al^[14]의 실험값과 거의 일치하였고 E/N : 60~300(Td)에서는 D_L/μ (v)값이 증가하였다. 이것은 여기충돌에 의한 drift속도의 상승과 전리충돌에 의한 전자수 보존상태의 영향을 받는 것으로 생각된다.

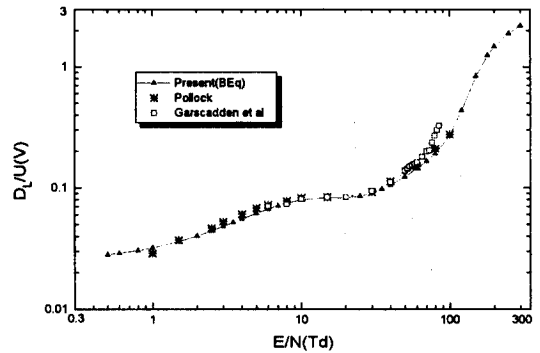


그림 6. SiH₄ 가스에서 종방향 특성에너지
Fig. 6. Longitudinal characteristic energy in SiH₄ gas

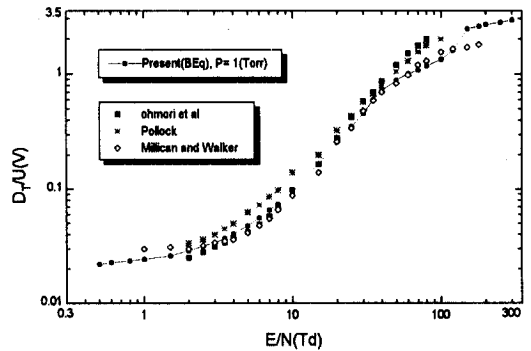


그림 7. SiH₄가스에서 횡방향 특성에너지
Fig. 7. Transverse characteristic energy in SiH₄ gas

횡방향 특성에너지(D_T/μ)는 그림7에서 전계에 수직한 방향으로 확산하는 비율이 E/N : 2~40(Td)범위에서는 Pollock과 Ohmori^[13]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/N 의 증가에 따라서 이동도는 감소하고 확산계수는 증가한 것으로 생각된다.

5.5 평균에너지

전자의 평균에너지($\bar{\epsilon}$)는 전극간거리 및 시간의 함수로써 계산되는 전자에너지분포, 전자이동속도에 관계되는 물리량이다.

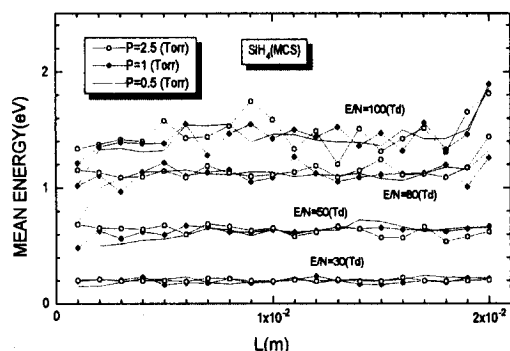


그림 8. SiH4가스에서 전자의 평균에너지
Fig. 8. Mean energy of electrons in SiH4 gas

그리고 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.

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 나타내었다.

5.6 에너지 분포함수

전자에너지분포 $F(\epsilon)$ 는 그림9와 10에서 탄성 및 비탄성충돌을 고려하여 $E/N=30, 50$ (Td) 및 압력 P: 0.5, 1, 2.5(Torr)에 대하여 나타내었다.

그림9, 10에서 나타났듯이 MCS로 추적하여 나타난 전자에너지분포는 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^[7]법과 SST^[7]법에 의한 결과 간에 전반적으로 차이를 나타내었

다. 또한 여기로 인하여 전자의 에너지를 잃어버리는 것이 크면 비평형영역도 크게 나타난 것으로 생각된다.

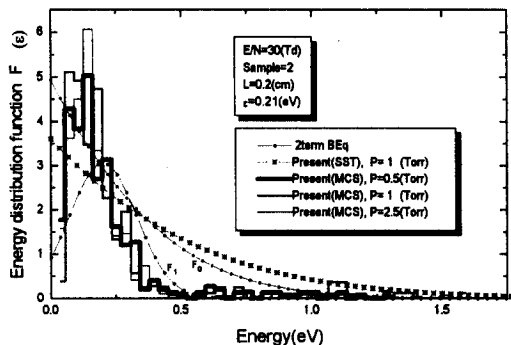


그림 9. SiH4가스에서 전자에너지 분포함수
Fig. 9. Energy distribution function of electrons in SiH4 gas

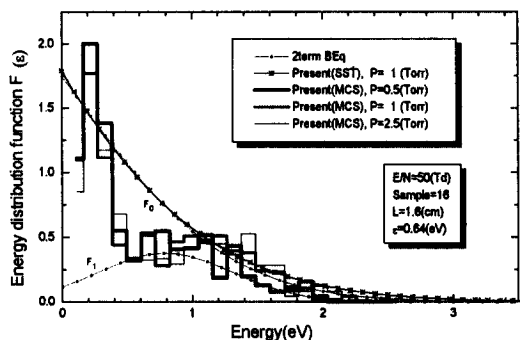


그림 10. SiH4가스에서 전자에너지 분포함수
Fig. 10. Energy distribution function of electrons in SiH4 gas

저온 플라즈마 중의 전자에너지분포는 전체효과에 의하여 Maxwell-Boltzmann 분포가 높은 에너지 측으로 이동하고 기체입자와의 비탄성충돌 단면적(부착, 전리, 해리, 진동)에 의하여 에너지분포가 감소하는 것으로 나타났으며 일반적으로는 박막형성에 사용되는 저온 플라즈마중의 전자의 에너지분포함수는 Maxwell-Boltzmann 분포로 가정한다

6. 결 론

본 논문에서는 SiH_4 가스의 전자충돌단면적을 이용하여 $E/N:0.5\sim 300(\text{Td})$, 압력 $P:0.5, 1, 2.5(\text{Torr})$ 범위에서 방전파라미터의 특성을 비평형 상태에서 몬테칼로 시뮬레이션과 볼츠만방정식으로 해석한 결과 다음과 같은 결론을 얻었다.

1. SiH_4 플라즈마의 전자기동속도(V_d)의 전체적인 변화는 상대전계의 세기 $E/N:3.5\sim 120(\text{Td})$ 영역에서는 압력의 증가에 따른 실측치와 거의 일치하였으나 $E/N:15\sim 80(\text{Td})$ 영역에서는 전계 E/N 이 증가함에 따라 전자기동속도가 감소하는 현상 즉 부구배(NDC : Negative Differential Conductivity)의 특성이 나타났다. 그리고 $E/N:80(\text{Td})$ 이상의 영역에서는 전자기동속도(V_d)가 증가함에 따라 전기전도특성이 향상된다는 결론을 얻을 수 있었다.

2. 종방향 확산계수(ND_L)는 Q_m 에 Ramsauer minimum을 가진 가스들의 독특한 특징을 나타낼 수 있었다.

3. 종방향 특성에너지(D_L/μ)는 $E/N:1.5\sim 60(\text{Td})$ 영역에서는 실측치와 거의 일치하였으나 $E/N:60\sim 300(\text{Td})$ 에서는 여기와 전리충돌의 반응으로 비탄성충돌 작용이 일어나고 있음을 예측할 수 있다. 그리고 횡방향 특성에너지(D_T/μ)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 평균에너지를 사용하여 계산하였고 그 값으로부터 전자군 파라미터를 계산하였다. 그리고 전자여기나 전리 등의 비탄성충돌과 진동여기 단면적의 공명효과 때문에 방전파라미터의 특성에 큰 영향이 나타남을 확인할 수 있었다.

참고문헌

- 大森義行, 下妻光夫, 田頭博昭, "SiH₄ 가스의電子衝突斷面積および 스우오-ム 파라메ータ" 電氣學會研究會資料, ED-86-114, HV-86-34, 1988.
- 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.
- 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.
- Pollock WJ, "Momentum Transfer and Vibrational Cross-sections in Non-polar Gases" Trans. Faraday Soc., 64, pp.2919-26, 1988.
- Cottrell T.L, Walker. I. C "Electron collision cross sections for the monosilane molecule" Trans. Faraday Soc. 61, pp.1583-1593, 1965.
- C. Jacoboni and P. Lugli, "The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation", Springer-Verlag Wien, pp.1-4, 1989.
- 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.
- 津田孝夫, "モンテカルロ法とシミュレーション", 培風館, 1969.
- Haller I, "Importance of chain reactions in the plasma deposition of hydrogenated amorphous silicon" J.vac. Sci. Technol.A, pp. 1376-82, 1983.
- M. Kurachi, Y. Nakamura "Electron collision cross sections for the monosilane molecule", J.phys.D: Appl. phys.22, pp.107-112, 1987.
- Stephen M. Rossnagel, Jerpome J. Cuomo, William D Westwood, Handbook of Plasma Processing Technology", Noyes Publications, 1990.
- 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.
- 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.
- Gar scadden, Duke GL and Bailey WF, Appl. Phys. Lett., 43, pp.1012-1014, 1983.