# TMS 蒸気の電子衝突断面積の推定 Estimation of Electron Collision Cross Sections for TMS vapour 室蘭工大, <sup>0</sup>川口 悟, 佐藤 孝紀, 伊藤 秀範 Muroran I. T., <sup>o</sup>Satoru Kawaguchi, Kohki Satoh and Hidenori Itoh E-mail: s2124049@mmm.muroran-it.ac.jp

## 1. はじめに

電子衝突断面積は、ガス中の電子の挙動を表す最も 基礎的なデータである。本研究では、PECVD 法によ る SiCおよびDLC成膜において使用されるテトラメチ ルシラン(Si(CH<sub>3</sub>)4, TMS)に注目し、これまでに報告さ れた Bordage<sup>[1]</sup>および Hein *et al.*<sup>[2]</sup>の断面積セットを評 価するとともに、妥当な断面積セットを推定すること を目的とする。

### 2. 電子衝突断面積

Fig. 1(a)は、本研究で推定した TMS 蒸気の電子衝突 断面積のセットを示す。運動量移行断面積 qm について は、 ε≥100 eV において Sugohara et al.<sup>[3]</sup>の実測値を使用 し, その他の範囲では, Bordage および Hein et al.の推 定値を参考に推定した。振動励起断面積 qvib について も, Bordage および Hein et al.の推定値をベースにして おり,換算電界 E/N が低い範囲における電子ドリフト 速度の計算値が実測値と一致するように推定した。電 子付着断面積 qaについては, Hein et al.の推定値を使用 した。電子励起断面積 qex に関しては, Huber et al.<sup>[4]</sup>が 測定した TMS 蒸気中の電子のエネルギー損失スペク トルより、6 種類の電子励起を仮定し、実効電離係数 の計算値が実測値と一致するように断面積の形状を推 定した。電離断面積 qiについては、1 種類の直接電離 および 15 種類の解離性電離で構成し, Basner et al.<sup>[5]</sup> の実測値を使用した。Fig.1(b)は、生成される正イオン ごとに分けた電離断面積を示す。

#### 3. 計算方法および条件

Monte Carlo simulation (MCS)によって電子の振舞い をシミュレートし, Steady State Townsend 実験および Time of Flight 実験に沿ったサンプリングによって平均 到着時間ドリフト速度  $W_m$ ,縦方向拡散係数  $ND_L$ およ び実効電離係数( $\alpha-\eta$ )/Nを算出した。また,電子飛行 時間の決定には Null Collision 法を用いた。シミュレー ションでは,電子と中性分子の衝突のみを考慮し,気 体分子数密度を  $N=3.535 \times 10^{16}$  cm<sup>-3</sup> (0°C, 1 Torr)とした。

#### 4. 計算結果および考察

Fig. 2 は、推定した断面積セットを用いて MCS によって算出した縦方向拡散係数 NDL を、Double-shutter 法による実測値<sup>[6]</sup>と併せて示す。 $E/N \leq 2000$  Td において、推定したセットから得られた値が実測値と良く一致していることがわかる。E/N > 2000 Td では、実測値のばらつきが大きいため、得られた値の正確な評価はできないが、我々のセットによる算出値は、Bordage および Hein *et al.*が報告したセットから得られた値と 傾向が異なる。我々のセットにおける全電離断面積  $q_{\perp total}$ は、Bordage および Hein *et al.*が推定した  $q_{\perp total}$ よりも大きい値であるため、高E/Nにおいて、従来のセットによる算出値および Yoshida *et al.*の実測値よりも 低い値になったと考えられる。本研究で使用した Basner et al.の実測値よりも低い q<sub>i\_total</sub>が,実験および 理論計算によって報告されており<sup>(7)</sup>,今後高エネルギ 一領域において電子衝突断面積の詳細な検討が必要で ある。

電子ドリフト速度および実効電離係数に関しては, 推定したセットから得られた値が実測値と全範囲の *E/N*で一致することを確認した。

#### 参考文献

- [1] M. C. Bordage: Plasma Sci. Technol. 9 (2007) 756
- [2] P. X. Hein et al.: J. Korean Phys. Soc. 61 (2012) 62
- [3] R. T. Sugohara et al.: Phys. Rev. A, 84 (2011) 062709
- [4] V. Huber et al.: J. Phys. Chem. A, 102 (1998) 3524
- [5] R. Basner *et al.*: Int. J. Mass Spectrom. Ion Process, 153 (1996) 65
- [6] K. Yoshida et al.: J. Phys. D, 38 (2005) 1918
- [7] 例えば, S. McGinnis *et al.*: Chem. Phys. Lett. **232** (1995) 99



Fig.2 Longitudinal diffusion coefficient as a function of E/N for TMS vapour.