

## Cl<sub>2</sub> ガスの電子衝突断面積

### Electron collision cross sections of Cl<sub>2</sub> gas

室蘭工大<sup>1</sup>, 学振特別研究員<sup>2</sup> 川口 悟<sup>1,2</sup>, 高橋 一弘<sup>1</sup>, 佐藤 孝紀<sup>1</sup>

Muroran I.T.<sup>1</sup>, JSPS Research Fellow<sup>2</sup> S. Kawaguchi<sup>1,2</sup>, K. Takahashi<sup>1</sup>, and K. Satoh<sup>1</sup>

E-mail: s2124049@mmm.muroran-it.ac.jp

#### 1. はじめに

電子衝突断面積は、ガス分子と電子の衝突確率を表す最も基礎的なデータであり、放電プラズマ応用技術の高性能化のために不可欠である。このため、プラズマプロセスで用いられる種々の気体材料に関して精確な電子衝突断面積セットを整備することが望まれている。本研究では、半導体デバイス製造における Si のプラズマエッチングに用いられる Cl<sub>2</sub> ガスに着目し、このガスの精確な電子衝突断面積セットを提案することを目的とする。

Cl<sub>2</sub> ガスの電子衝突断面積セットに関しては、Tuan and Jeon<sup>[1]</sup>の断面積セット、Gregório and Pitchford<sup>[2]</sup>の断面積セットが報告されている。これらの断面積セットは、Cl<sub>2</sub> ガス中の実効電離係数、電離係数、電子付着係数の計算値が実測値<sup>[3]</sup>と合うように決定されているが、Cl<sub>2</sub> ガス中の電子ドリフト速度と縦方向拡散係数に関しては、計算値と実測値の比較が行なわれていない。近年、Cl<sub>2</sub> ガス中の実効電離係数、電子ドリフト速度、縦方向拡散係数が測定されており<sup>[4]</sup>、これらの実験データを使うことで、電子ドリフト速度と縦方向拡散係数の観点からも Cl<sub>2</sub> ガスの電子衝突断面積セットを検討することが可能となった。ここでは、従来の電子衝突断面積セットを用いて得られる実効電離係数および電子ドリフト速度の計算値を実測値と比較するとともに、電子輸送係数の実測値を再現する計算値が得られる断面積セットを推定した結果について報告する。

#### 2. 電子衝突断面積および計算方法

Fig. 1 は本研究で推定した Cl<sub>2</sub> ガスの電子衝突断面積セットを示す。弾性衝突運動量移行断面積  $q_m$  については、電子エネルギー  $\epsilon$  が 1 eV 以下の範囲においては、Gregório and Pitchford<sup>[2]</sup>の推定値を使用し、 $\epsilon > 1$  eV においては、Gote and Ehrhardt<sup>[5]</sup>が測定した微分断面積を積分して得られる  $q_m$  を基に形状を決定した。振動励起断面積  $q_{vib}$  については、3 種類の振動励起 ( $v = 0 \rightarrow 1, 2, 3$ ) を考慮しており、Ruf *et al.*<sup>[6]</sup>の理論計算値を使用した。中性解離断面積  $q_{nd}$  については、Rescigno<sup>[7]</sup>が理論計算によって求めた 5 種類の解離性電子励起 ( $^3\Pi_u, ^1\Pi_u, ^3\Pi_g, ^1\Pi_g, ^3\Sigma_u$ ) に関する断面積を 2.34 倍して使用した。非解離性電子励起断面積  $q_{ex}$  については、Rescigno<sup>[7]</sup>が理論計算によって求めた 2 種類の電子励起 (Rydberg  $^1\Pi_u, ^1\Sigma_u$ ) に関する断面積を 2.34 倍して使用した。解離性電子付着断面積  $q_a$  については、Gregório and Pitchford<sup>[2]</sup>が Ruf *et al.*<sup>[6]</sup>およ

び Kurepa<sup>[8]</sup>の実測値に基づいて決定した  $q_a$  をそのまま使用した。また、イオン対生成(Cl<sup>+</sup> + Cl<sup>-</sup>)に関する断面積  $q_{ip}$  についても、Gregório and Pitchford<sup>[2]</sup>が Kurepa<sup>[8]</sup>の実測値に基づいて決定した  $q_{ip}$  をそのまま用いた。電離断面積  $q_i$  については、4 種類の部分断面積(Cl<sub>2</sub><sup>+</sup>, Cl<sup>+</sup> + Cl, Cl<sup>2+</sup> + Cl, Cl<sub>2</sub><sup>2+</sup>)で構成されており、Basner and Becker<sup>[9]</sup>の実測値の 0.85 倍を通るように決定した。

Monte Carlo 法によって一様な直流電界  $E$  が印加された Cl<sub>2</sub> ガス中の電子の挙動をシミュレートし、サンプリングによって電子の平均到着時間ドリフト速度  $W_m$ 、電離係数  $(\alpha-\eta)/N$ 、電子付着係数  $\eta/N$ 、実効電離係数  $(\alpha-\eta)/N$ 、縦方向拡散係数  $ND_L$  を導出する。ここで、 $N$  は気体分子数密度であり、 $3.535 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  (0 °C, 1 Torr)とした。

#### 3. 計算結果

Fig. 2 は Cl<sub>2</sub> ガス中の実効電離係数  $(\alpha-\eta)/N$  および平均到着時間ドリフト速度  $W_m$  の計算値を実測値<sup>[3,4]</sup>と併せて示す。本研究で推定した断面積セットを用いて得られた計算値は実測値と良く一致しており、推定した断面積セットの妥当性が確認できる。Gregório and Pitchford<sup>[2]</sup>の断面積セットから得られる  $(\alpha-\eta)/N$  の計算値は  $E/N \leq 200$  Td および  $E/N \geq 600$  Td において、それぞれ González-Magaña and Urquijo<sup>[4]</sup>の実測値および Božin and Goodyear<sup>[3]</sup>の実測値よりも低い値となっている。また、 $W_m$  の計算値についてはすべての  $E/N$  で実測値よりも低くなっている。Tuan and Jeon<sup>[1]</sup>の断面積セットから得られる  $(\alpha-\eta)/N$  の計算値については、300 Td 付近を除いて実測値と一致していない。また、 $W_m$  の計算値に関しては、100 Td 付近および  $E/N \geq 440$  Td において実測値よりも高い値となる。

#### 参考文献

- [1] D.A. Tuan and B.-H. Jeon: J. Phys. Soc. Japan **80**, 084301 (2011).
- [2] J. Gregório and L.C. Pitchford: Plasma Sources. Sci. Technol. **21**, 032002 (2012).
- [3] S. E. Božin and C. C. Goodyear: Brit. J. Appl. Phys. **18**, 49 (1967).
- [4] O. González-Magaña and J. de Urquijo: Plasma Sources. Sci. Technol. **27**, 06LT02 (2018).
- [5] M. Gote and H. Ehrhardt: J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **28**, 3957 (1995).
- [6] M.-W. Ruf *et al.*: J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **37**, 41 (2004).
- [7] T.N. Rescigno: Phys. Rev. A **50**, 1382 (1994).
- [8] M.V. Kurepa: Chem. Phys. **59**, 125 (1981).
- [9] R. Basner and K. Becker: New. J. Phys. **6**, 118 (2004).

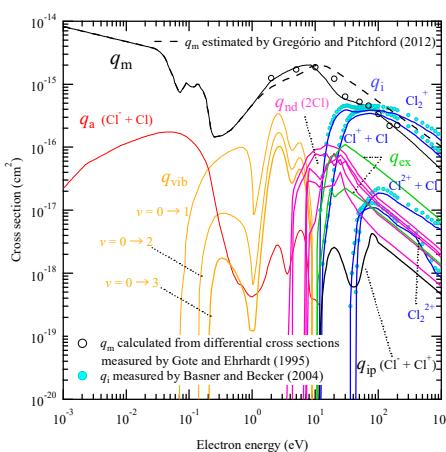


Fig. 1. Present set of electron collision cross sections for Cl<sub>2</sub> gas.

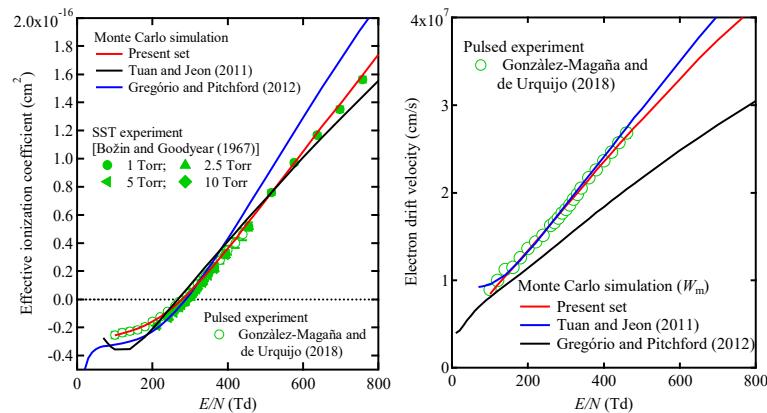


Fig. 2. Electron transport coefficients in Cl<sub>2</sub> gas.