

CO ガスの電子衝突断面積

Electron collision cross sections of CO gas

室蘭工大¹, 成蹊大², [○]渡辺 翔也¹, 川口 悟², 高橋 一弘¹, 佐藤 孝紀¹

Muroran I. T.¹, Seikei University², [○]Shouya Watanabe¹, Satoru Kawaguchi², Kazuhiro Takahashi¹ and Kohki Satoh¹

E-mail: 20043070@mmm.muroran-it.ac.jp

1. はじめに

CO ガスは、磁性体材料と反応して揮発性を有する遷移金属カルボニルを生成するため、磁性体素子のプラズマエッチングでの利用^[1]が注目されている。これに伴って、エッチング性能を予測するコンピュータシミュレーションが行われており、その精度向上のため、正確な電子衝突断面積セットが求められている。

CO ガスの電子衝突断面積セットには、Itikawa^[2], Ogloblina *et al.*^[3]などの報告がある。最近報告されたOgloblina *et al.*の断面積セットでは、従来のセットに加え、回転励起と回転脱励起衝突も考慮された詳細なセットとなっている。しかし、回転励起と脱励起衝突の関係に矛盾する部分も含まれており、修正の必要がある。

本研究の目的は、詳細かつ正確なCO ガスの電子衝突断面積セットの提案である。ここでは、Itikawa およびOgloblina *et al.*の断面積セットを基に、広範囲の換算電界において、実測値に一致する電子輸送係数を与える断面積セットを、電子スオーム法により推定したのでその結果を報告する。

2. 電子衝突断面積および計算方法

Fig.1 は、本研究で推定した電子衝突断面積セットを示す。運動量移行断面積 q_m については電子エネルギー ε が $\varepsilon > 1$ Td では Itikawa が報告したものを使用し、 $\varepsilon \leq 1$ Td では形状を推定した。回転励起断面積 $q_{J \rightarrow J+1}$ については17種類を考慮し、しきい値はOgloblina *et al.*と同様とした。また、回転準位が $J = 0 - 4$ のものについてはOgloblina *et al.*が報告したものを0.6倍して用い、 $J = 5 - 16$ のものについては形状を推定した。回転脱励起断面積 $q_{J \rightarrow J-1}$ については詳細つり合いの原理にもとづき、(1)式を用いて求めた^[4]。

$$q_{J \rightarrow J-1} = \frac{g_{J-1}}{g_J} \frac{\varepsilon + \varepsilon_{th}}{\varepsilon} q_{J-1 \rightarrow J} (\varepsilon + \varepsilon_{th}) \quad (1)$$

ここで、 ε_{th} は $q_{J-1 \rightarrow J}$ のしきい値を示す。振動励起断面積 q_{vib} については10種類を考慮し、Ogloblina *et al.*が報告したものをそのまま使用した。電子励起断面積(7種類) q_{ex} 、中性解離断面積 q_{nd} 、解離性電子付着断面積 q_a および電離断面積(6種類) q_i についてはItikawa が報告したのものを使用したが、大きさについては q_{ex} , q_{nd} , q_a および q_i に対して、それぞれ1.3, 1.28, 4.0 および0.95倍した。

ガスの温度および圧力をそれぞれ 0°C および 1 Torr とし、一様な直流電界が印加された空間中の電子のふるまいをMonte Carlo 法によりシミュレートし、サンプリングにより電子輸送係数を求めた^[5]。なお、CO分子の一部は、 0°C において回転励起状態であるため、回転準位 J に対するポピュレーション δ_J を(2)式により算出し、

回転準位毎の分子数密度を求めた。

$$\delta_J = \frac{2J+1}{\sum_{i=0}^{17} \delta_i} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{th}}{kT_g}\right) \quad (2)$$

ここで、 k はボルツマン定数、 T_g はガス温度を示す。

3. 計算結果

Fig.2 は、本研究で推定した断面積を用いて計算した平均到着時間ドリフト速度 W_m を実測値^[6-10]と併せて示す。 W_m の値は、広範囲の換算電界で実測値とよく一致しており、この断面積セットの妥当性が確認できる。また、ここでは示していないが、電離係数、電子付着係数および縦方向拡散係数についても実測値と計算結果が広範囲の換算電界でよく一致した。

謝辞 本研究は、東京エレクトロン宮城(株)の助成を受けたものである。

参考文献

- [1] 例えば, N. Matsui *et al.*: Vacuum, **66**, 3-4, 479 (2002)
- [2] Y. Itikawa: J. Phys. Chem. Ref. Data, **44**, 1, 013105 (2015)
- [3] P. Ogloblina *et al.*: Plasma Sources Sci. Technol., **1**, 29(2020)
- [4] M. Yousfi *et al.*: Phys. Rev. E, **49**, 1, 3264(1994)
- [5] 佐藤: 応用物理, **89**, 5, 253(2020)
- [6] Y. Nakamura: J.Phys. D: Appl. Phys., **20**, 933(1987)
- [7] H. T. Saelee *et al.*: IEE J. Solid-State Electron Dev., **1**, 111(1977)
- [8] J. L. Pack *et al.*: Physical Review, **127**, 6 (1962)
- [9] E. B. Wagner *et al.*: J. Chem. Phys., **47**, 9 (1967)
- [10] W. Roznerski and K. Leia: J. Phys. D: Appl. Phys., **17**, 2 (1984)

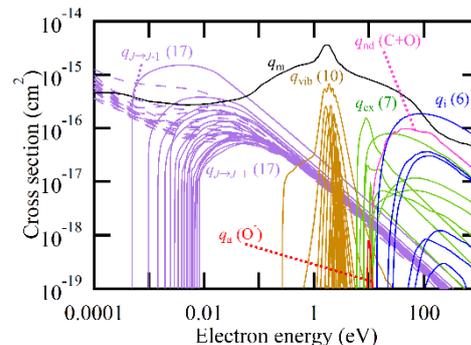


Fig.1 Electron collision cross sections of CO.

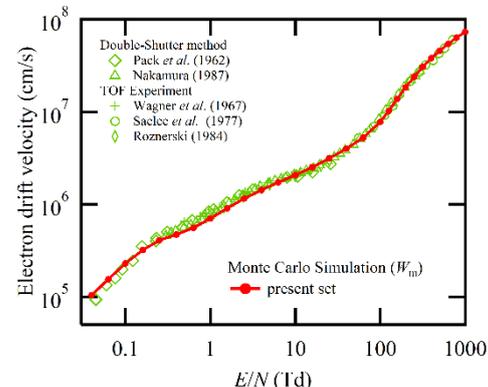


Fig.2 Electron drift velocity in CO as a function of reduced electric field.