

# 한국핵융합에너지 연구원 플라즈마 물성 데이터 연구 현황

송미영

(한국핵융합에너지연구원 플라즈마기술연구소 플라즈마물성데이터센터)

## 1. 서론

세상에 존재하는 물질은 고유한 상태를 지니고 있으며, 목적에 맞게 변형되어 우리 생활에 기여하고 있다. 물질의 기체, 액체, 고체 상태는 물질을 구성하는 원소인 원자가 결합하는 에너지에 따라 정의 된다. 산업에서 사용되는 원소재는 물질이 기체, 액체, 고체 중 어떤 상태로 존재하느냐에 따라서 처리하는 방식이 변한다. 우리는 원소재를 가공하여, 원하는 기능이 부여된 제품을 만들고 이를 사용한다. 반도체 및 디스플레이의 경우, 수백회의 공정을 거쳐서 만들어지며, 주요한 공정으로 인식되는 식각, 증착, 세정 등의 공정이 플라즈마 공정으로 일컬어진다. 이런 플라즈마 공정은 물질의 플라즈마 상태를 활용하여 대면소재를 식각하거나 증착하여 원하는 기능을 부여하는 한다.

플라즈마 공정의 플라즈마가 만들어지는 과정은 3단계로 설명할 수 있다. 플라즈마 발생 초기단계는 닫힌 공간 안에 존재하는 기체와 외부에서 인가한 전자기장에 의해 에너지를 받은 공간 내 자유전자가 물리적 충돌을 일으켜, 기체 분자에 변화가 생기기 시작한다. 이때 기체 분자는 전자를 잃어 양이온이 되기도 하고, 기체 분자 내 원자간 결합이 끊어져서 해리되어 다른 종류의 분자 또는 활성종으로 변화되기도 하며, 기체 분자 내 전자가 들뜬 상태로 여기 되기도 한다. 이런 반응들을 통해 전자, 이온, 들뜬 분자, 활성

종 등 다양한 입자들이 만들어 진다.

2단계로 접어 들면, 들뜬 분자에서 방출되는 광자에 의해 충돌 반응이 유도되며, 생성된 이온 및 활성종들이 충돌에 의해 더욱 다양한 입자를 생성되는 물리-화학적 반응이 활성화되어 폭발적으로 플라즈마 상태를 만들기 시작한다. 이후 준평형 상태의 플라즈마 상태가 안정화 된다. 설명으로 장황하지만 이는 실제로는 아주 짧은 시간 안에 이루어진다. 안정화된 플라즈마 상태내에서는 전자, 음이온, 양이온, 준안전 상태로 들뜬 분자, 활성종 등 다양한 입자가 존재하여, 내부에 발생된 전자기장을 통한 에너지를 받은 입자들은 에너지를 가지고 대면 소재에 입사하여 물리적 반응을 하거나 활성종과 대면 소재 표면에서 화학 반응을 활성화되어 대면 소재의 기능성을 부여한다.

본 기획은 이런 플라즈마 공정을 이해의 근간이 되는 원자 및 분자 플라즈마 물성 연구 및 연구 기관에 대해 소개하고자 한다.

## 2. 플라즈마 물성 정의 및 플라즈마 물성 데이터 센터

### 2.1. 플라즈마 물성 데이터 센터

한국핵융합에너지연구소는 플라즈마 물성의 중요성을 일찍이 인식하고 2006년 산업통상자원부로부터 플라즈마 물성 참조표준 개발 및 보급을 목적으로 하



그림 1. 플라즈마 물성 데이터 센터

는 플라즈마 물성데이터센터 (1호)로 지정 받아 국내 유일 플라즈마 공정에서 활용되는 가스 원자/분자의 물리, 화학적 특성을 정확도와 신뢰도를 바탕으로 과학적으로 분석 평가하여 참조 표준을 개발하여 제공하며, 이를 산업체가 보다 잘 활용할 수 있도록 기초적인 가이드라인을 제시하여 플라즈마 기술 관련 산학연 관련 기관들의 플라즈마 공정 설계 기술의 자립화를 지원하고 있다.

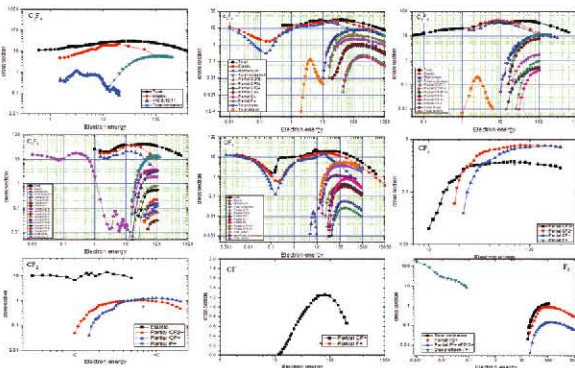


그림 2. 플라즈마 물성 참조표준 ( $C_xF_y$ )

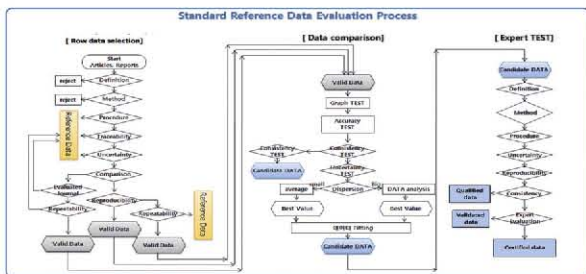


그림 3. 플라즈마 물성 참조표준 개발 절차

현재 플라즈마 물성 데이터센터는 플라즈마 공정과 관련된 가스 90종의 900여건의 참조 표준과 10만여 건의 데이터 개발하여 플라즈마 해석 모델링 및 공정 설계 모델링에 활용하고 있다. 그림 2는 논문에 발표된 전자 충돌에 의한  $C_xF_y$ 분자의 산란 단면적 데이터를 수집, 분류하고 이를 그림 3의 절차에 따라 평가하여 개발된 플라즈마 물성 참조표준 개발 사례이다.

### 2.2. 플라즈마 물성 데이터 정의

플라즈마 물성 데이터는 기체 분자가 플라즈마 상태가 되는 과정 및 플라즈마가 표적 물질과 반응 메커니즘 연구를 통해 생성되는 데이터를 의미하며, 이는 플라즈마 이해를 위한 전반적인 과학기술 정보라 할 수 있다. 또한 플라즈마 공정 설계에 있어서 매우 중요한 데이터로 산업체가 연구하기에는 시간과 비용이 많이 들어가는 기초 분야이기 때문에 데이터센터를 지정하여 연구하고 있다.

플라즈마 물성 데이터에는 플라즈마를 구성하는 전자, 이온, 원자 및 분자들의 물리적 충돌 물성 데이터, 화학 반응 물성 데이터, 플라즈마 상태의 측정을 통한 물성데이터가 포함된다. 상세 데이터 종류는 그림 4와 같다.



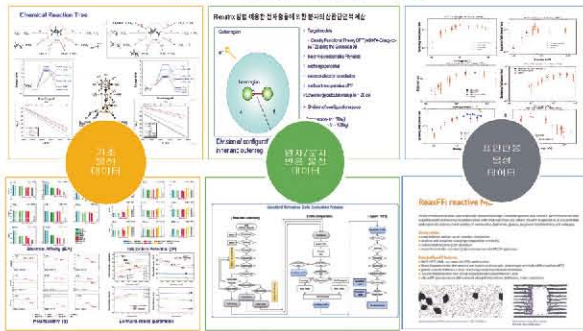
그림 4. 플라즈마 물성 데이터 정의

### 2.3. 플라즈마 물성 데이터 연구 기반

플라즈마 물성 데이터센터에서는 물성 데이터 생산을 위한 이론 연구 기반과 측정 기반을 구축하고, 표준 생산 절차를 반영하여 신규 가스에 대한 플라즈마 물성을 생산하고 있다.

그림 5의 플라즈마 물성 이론 연구 기반은 계산 화학 기반의 다양한 프로그램 (Gaussian09, GAMESS, KiSTheIP (Kinetic and Statistical

[플라즈마 물성 이론 연구 기반]



[플라즈마 물성 데이터 측정 장치]



그림 5. 플라즈마 물성 데이터 생산 기반

Thermo-dynamical Package), Molpro)과 물리 화학 계산 프로그램 (QEC, ReaxFF 등) 등이 있으며, 플라즈마 물성 데이터 측정 장치로는 총산란 단면적 측정, 해리 산란 단면적 측정, 생체 분자의 저에너지 전자에 의한 손상 측정, 플라즈마 상태 물성 측정 장치를 구축하여 운영 중이다.

보유된 연구 기반을 통해 생산된 데이터는 표 1과 같으며, 관련 데이터 들은 <https://dcpp.kfe.re.kr>을 통해 무료로 제공되고 있다. 또한 데이터 수요 발생시, 보유 기반을 통해 데이터를 생산 및 제공하고 있다.

표 1. 플라즈마 물성 데이터센터 보유 데이터

데이터	건수
기초 물성	1516
반응 물성 수집 (CS)	33,927
반응 물성 수집 (RC)	67,382
반응 물성 평가	933
표면 반응 물성	63
평가된 전자 충돌 데이터 셋	H2, D2, DH, CH4, C2H2, NF3, N2O, NO, NO2, H2O
시뮬레이션을 위한 데이터 셋	C4F6/C4F8/CH2F2/O2/Ar, HBr/Cl2/Ar, NF3/Ar, BF3/Ar, C3F8/Ar, N2, Ar

### 3. 플라즈마 물성 데이터 연구

이번 절에서는 플라즈마 물성 데이터 중 기초물성, 반응 물성 연구에 대해 예시를 통해 자세히 설명하고자 한다.

#### 3.1. 원자 및 분자 기초 물성 연구

기초 물성은 기체를 구성하는 원자 및 분자의 기본 물리적, 화학적 물성으로, 분자의 구조, 분자의 경우 원자간 결합 거리 및 결합 에너지, 전자 친화도, 이온화 에너지, 분극률, 비열, 표준엔탈피, 표준엔트로피, 전자의 궤도에너지, 전자결합에너지, 화학 반응 경로 및 계수 등을 의미한다. 이는 DFT (Density Functional Theory) 또는 TST (Transition State Theory)를 통해 얻어질 수 있다. 특히 그림 6과 같은 분자의 화학 반응 경로는 분자의 구조 변화에 영향을 주는 에너지 정보를 제공해서, 플라즈마 발생시 필요한 최소 에너지에 대한 정보를 준다.

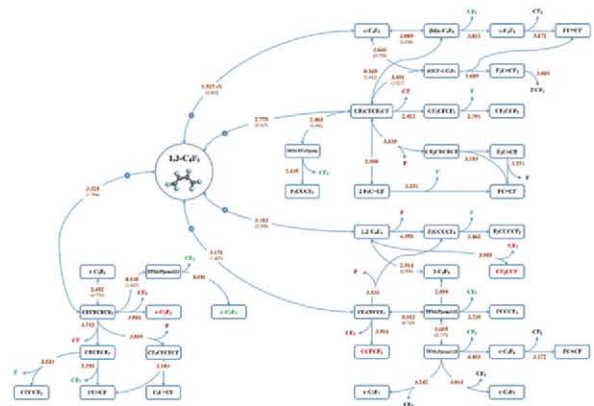


그림 6. 1,3-C<sub>4</sub>F<sub>6</sub> 분자의 화학 반응 경로

특히 표 2와 같은 분자의 기초물성 중 분극률값 ( $\alpha$ )은 이온-분자 충돌에 의한 전하교환 반응계수를 계산하는데 중요한 값이 되며, 전자친화도 (EA)는 이온-이온 반응에 의한 중성입자 생성반응 계수를 계산하는데 필요한 값이다. 또한 이온화에너지 (IP)는 플라즈마 생성에 중요한 전자 생성을 위해 필요한 에너지를 나타낸다. 이러 기초물성을 통해서 사용하려는 가스에 따라 플라즈마 발생에 필요한 에너지 정보를 확보하고 이를 통한 플라즈마 발생을 위한 전력인가 방식

표 2. C<sub>x</sub>F<sub>y</sub> 분자의 기초 물성

Molecule	IP (eV)		$\alpha$ (Å <sup>-1</sup> )		EA (eV)	
	Exp.	Theo.	Exp.	Theo.	Exp.	Theo.
CF	9.55 ± 0.01	9.725	2.053	2.119	0.45 ± 0.05	0.524
CF <sub>2</sub>	11.465 ± 0.025	12.055	2.449	2.450	0.100 ± 0.020	0.255
CF <sub>3</sub>	10.6	11.041	2.531	2.532	1.7 ± 0.2	1.623
CF <sub>4</sub>	16.2 ± 0.1	15.699	2.824	2.846	-	-
C <sub>2</sub> F	-	11.785	-	4.451	-	3.098
C <sub>2</sub> F <sub>2</sub> (FC-CF)	11.18	11.145	3.542	3.533	-	0.533
C <sub>2</sub> F <sub>2</sub> (C-CF <sub>2</sub> )	-	11.201	-	3.867	2.250 ± 0.000	2.317
C <sub>2</sub> F <sub>3</sub>	-	11.738	-	4.127	2.06 ± 0.22	2.242
C <sub>2</sub> F <sub>4</sub>	10.12	10.276	4.352	4.349	-	-0.472
C <sub>2</sub> F <sub>5</sub>	10.0 ± 0.1	10.588	-	4.552	1.81 ± 0.15	1.731
C <sub>2</sub> F <sub>6</sub>	14.40	13.924	4.838	4.797	-	-1.541
2-C <sub>3</sub> F <sub>4</sub>	12.76	12.425	7.75	7.063	-	0.885
c-C <sub>3</sub> F <sub>4</sub>	-	11.420	7.414	7.362	-	0.566
1,3-C <sub>3</sub> F <sub>4</sub>	10.4	9.830	8.345	8.145	-	0.279
2-C <sub>3</sub> F <sub>4</sub>	11.1	11.285	-	8.466	0.79 ± 0.06	0.837
c-C <sub>3</sub> F <sub>4</sub>	11.6	11.795	-	7.801	0.63 ± 0.05	0.597

을 결정한다.

### 3.2. 플라즈마-원자/분자 반응 물성 연구

플라즈마는 전자와 원자/분자 간 충돌 반응을 통해서 생성되므로, 플라즈마-원자/분자 반응 물성은 충돌 산란 단면적으로 정의된다. 이는 에너지를 가진 전자가 원자 및 분자와 충돌할 확률을 나타낸 값이다. 만약 전자가 에너지 분포를 가지고 원자 및 분자와 충돌하는 경우를 반응 속도계수라고 정의 한다.

표 3. 전자 - 분자 충돌 반응<sup>[1]</sup>

반응명	반응식	플라즈마 변수
탄성 산란	$e + M \rightarrow e + M$	전자에너지 분포
회전 전이	$e + M(J) \rightarrow e + M(J')$	전자에너지 분포
진동 전이	$e + M(v) \rightarrow e + M(v')$	전자에너지 분포, 준안정 상태 입자 밀도
전자들뜸	$e + M \rightarrow e + M^*$	준안정 상태 입자 밀도
해리	$e + M \rightarrow e + A + B$	활성종 밀도
이온화	$e + M \rightarrow e + e' + M^+$	양이온 밀도, 전자 밀도
전자 부착	$e + M \rightarrow M^- + A + B$	음이온 밀도, 전자 밀도
운동량전달	$e + M \rightarrow e + M$	전자에너지 분포, 전자 수송계수
방출	$M^* \rightarrow M + h\nu$	복사선 방출, 활성종 밀도, 온도

특히 전자 충돌 후, 원자 또는 분자의 내부에너지가 변화할 경우, 이를 비탄성 충돌이라 하며, 탄성 및 운동량 전달 반응을 제외한 대부분의 충돌 반응이 여기에 해당한다. 비탄성 산란 단면적은 원자 및 분자의 반응이 일어나는 문턱에너지에서 산란 단면적 값이 0 이고 에너지가 증가할수록 산란 단면적은 유한한 값을

가진다. 여기서 문턱에너지란 원자 또는 분자가 가지고 있는 전자가 유효전자궤도를 이탈하는데 필요한 에너지를 의미하며, 전자가 원자 및 분자로부터 떨어져 나가는데 필요한 에너지를 이온화 에너지, 내부 유효 전자 궤도를 이동하는데 필요한 에너지를 여기 에너지로 정의할 수 있다. 정확한 충돌 산란 단면적을 계산하기 위해서는 슈뢰딩거 방정식을 풀어야 하나, 이는 수소 분자 이외의 경우에는 그해를 구하는 것이 매우 어렵다.

그러므로 입사 전자의 에너지가 큰 경우, 일차 Born 근사법을 통해서 산란단면적을 간단히 계산할 수 있으며, 이는 상당히 신뢰할 수 있다. 반면 입사 전자의 에너지가 낮은 경우, 입사 전자가 표적원자 또는 분자와 강하게 결합하여 원자 또는 분자의 최외각전자와 구별이 어려워져 이를 계산하기 위한 정교한 접근법이 필요해진다. 이런 경우 전자-중성 원자 및 분자

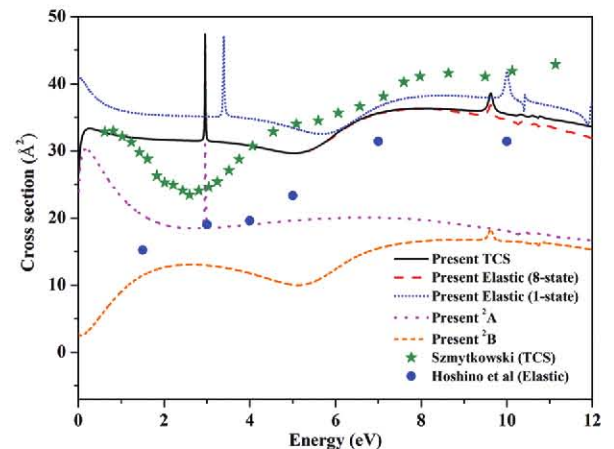


그림 7. C<sub>4</sub>F<sub>6</sub> 분자의 전자 충돌에 의한 탄성, 운동량 전달, 여기산란단면적<sup>[3]</sup>

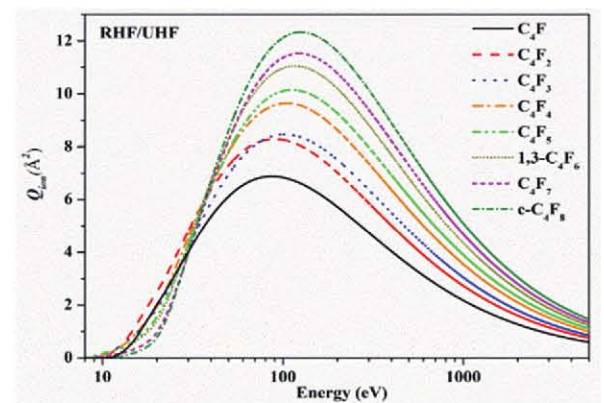


그림 8. C<sub>4</sub>F<sub>x</sub>(x=1~8) 분자의 전자 충돌에 의한 총이온화 산란 단면적<sup>[5]</sup>

의 충돌을 해석하는 접근법 중에서 R-matrix<sup>[2]</sup> 방법이 주로 사용된다.

또한 전자 충돌에 의한 분자의 총이온화 산란 단면적의 경우, Binary Encounter Bethe(BEB)<sup>[4]</sup> 이라는 비교적 간단한 Scaling 방법이 널리 사용되고 있다.

### 3.3. 고신뢰성 전자 충돌 반응 데이터 셋 개발

플라즈마 시뮬레이터를 이용하여 장비 내에서 일어나는 복잡한 물리-화학적 현상을 해석하기 위해서는 장비 내부와 표면에서 발생하는 물리-화학 반응 플라즈마 물성 데이터 셋이 필요하다. 이는 시뮬레이션 결과의 정합성과 매우 밀접한 관련이 있기 때문에 신뢰성 높은 데이터를 개발하는 연구는 시뮬레이터 개발만큼 중요한 연구 분야라고 할 수 있다.

그러므로 플라즈마 발생 초기 현상 설명에 필요한 전자 충돌에 의한 원자 및 분자의 충돌 산란 단면적 신뢰성 확보를 위해 글로벌 데이터 생산 분야 전문가들과 연구 네트워크를 구축하였고 분자의 전자 충돌에 의한 반응 물성을 최대한 포함한 데이터 셋을 개발하였다. 이를 통해 개발된 데이터는 CH<sub>4</sub><sup>[6]</sup>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub><sup>[7]</sup>, NF<sub>3</sub><sup>[8]</sup>, N<sub>x</sub>O<sub>y</sub> (x,y=1-2)<sup>[9]</sup>, H<sub>2</sub>O<sup>[10]</sup> 등이 있다.

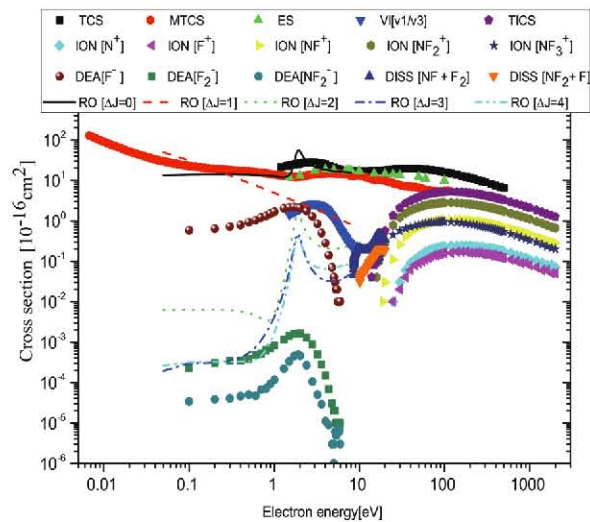


그림 9. 전자 충돌에 의한 NF<sub>3</sub> 분자의 산란 단면적<sup>[8]</sup>

### 3.4. 플라즈마 상태 물성 연구

플라즈마 상태 물성은 플라즈마 발생 이후 상태 정보로서 전자 밀도, 이온 밀도, 전자 및 이온의 에너

지 분포, 중성 입자의 온도와 밀도 및 분광 특성을 의미하며, 이는 전기적, 광학적 측정 장치를 통해 플라즈마 발생 장치로부터 플라즈마 상태 물성이 측정된다. 대부분의 플라즈마 연구실에서는 다양한 측정기기 (Langmuire Probe, Quadrupole Mass Spectroscopy, Optical Emission Spectroscopy, Laser Induced Fluorescence)를 플라즈마 발생 장치에 탑재하여 플라즈마 상태 물성을 측정하거나 플라즈마 시뮬레이터를 통해서 플라즈마 상태를 계산한다. 그러나 플라즈마 공정 장비의 경우, Optical emission spectroscopy (OES)를 유일하게 탑재하고 있어서, 이를 통해 단순 플라즈마 공정 모니터링을 하고 있다.

플라즈마 분광은 다양한 정보를 담고 있어서 어떻게 분석하느냐 에 따라 다양한 플라즈마 정보를 획득할 수 있다. 이에 최근 산업현장에서는 분광기의 고도화가 요구되고 있다. 현재 플라즈마 분광 신호를 분석하기 위해서 사용되는 미국 NIST의 스펙트럼 데이터는 원자가 방출하는 파장 정보로, 기체의 플라즈마 상태에서 분광 세기에 대한 정보는 제공하지 않는다.

그러므로 플라즈마 물성 데이터 센터는 2021년부터 플라즈마 분광 신호 분석에 사용할 기준 데이터가 필요함을 인식하고, 이는 플라즈마 발생 조건을 체계화하여 신뢰할 수 있는 플라즈마 상태 물성 데이터의 측정을 통해 얻는 방법을 연구 중이다.

## 4. 결론

점점 더 복잡한 플라즈마 공정의 요구는 과거엔 상상하지 못했던 속도와 정합성으로 플라즈마 해석이 가능해 지면서, 플라즈마 시뮬레이터의 사용을 가속화하고 있다. 점점 더 많은 연구자들이 플라즈마 장치와 공정을 설계하고 최적화하기 위해서 시뮬레이션을 적용하고 있다. 이는 시뮬레이션을 구동하기 위한 기반 데이터인 플라즈마 물성 데이터의 필요가 더욱 증가함을 의미한다.

또한 다양한 센서들을 장비에 부착하고 대량의 데이터를 수집하여 인공지능, 머신러닝 기법 등 고도의 데이터 분석 방법들을 도입하여도, 우리는 아직 플라즈

마 공정을 완벽히 이해하지 못하고 있다. 여러 이유가 있을 수 있겠지만, 빅데이터 분석에서 중요한 기준 데이터로서 플라즈마 물성 데이터가 부족하기 때문이다.

그러나 이런 플라즈마 물성 데이터는 물리/화학 기반의 기초 학문이 근간을 이루고 있기 때문에 현재 관련 분야를 연구하는 연구자들이 전세계적으로 줄어들고 있다.

그러므로 플라즈마 물성 데이터 센터는 탄소 중립 정책과 연계하여 반도체 및 디스플레이 산업 공정 혁신을 위한 환경 규제 공정 가스를 대체할 친환경 공정 가스 개발 및 친환경 플라즈마 공정 개발을 위해 필요한 플라즈마 물성데이터 연구를 위하여 보유한 인프라와 역량을 집중할 계획이다.

## 저자약력

### 송미영



- 2004년 : 한양대학교 물리학 박사
- 2008년 ~ 현재 : 한국핵융합에너지 연구원 플라즈마기술연구소 기반기술연구부 부장
- 2017년 ~ 현재 : 플라즈마물성데이터 센터 센터장
- 관심분야 : 전자-원자/분자 충돌 현상, 플라즈마 분광학, 플라즈마 물성 참조표준 개발

## 참고문헌

- [1] 조혁, 이윤섭, 정영대, 송미영, 전자-분자 충돌 : 플라즈마에서 분자 충돌과정, 교문사 (2021)
- [2] J. Tennyson, *Phys. Rep.* **491**, 29 (2010).
- [3] D. Gupta, M.-Y. Song, K.L. Baluja, H. Choi, J.-S. Yoon, *Phys. Plasma* **25**, 063504 (2018).
- [4] Y. -K. Kim and M. E. Rudd, *Phys. Rev. A* **50**, 3954 (1994).
- [5] D. Gupta, H. Choi, D.-C. Kwon, J.-S. Yoon, M.-Y. Song, *J. Phys. D* **51**, 155203 (2018).
- [6] M.-Y. Song, J.-S. Yoon, H. Cho, Y. Itikawa, G. Karwasz, V. Kokoouline, Y. Nakamura, J.Tennyson, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **44**, 023101 (2015).
- [7] M.-Y. Song, J.-S. Yoon, H. Cho, G. Karwasz, V. Kokoouline, Y. Nakamura, J.Tennyson, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **46**, 013106 (2017).
- [8] M.-Y. Song, J.-S. Yoon, H. Cho, G. Karwasz, V. Kokoouline, Y. Nakamura, J.Tennyson, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **46**, 043104 (2017).
- [9] M.-Y. Song, J.-S. Yoon, H. Cho, G. Karwasz, V. Kokoouline, Y. Nakamura, J.Tennyson, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **48**, 043104 (2019).
- [10] M.-Y. Song, J.-S. Yoon, H. Cho, G. Karwasz, V. Kokoouline, Y. Nakamura, J.Tennyson, A. Faure, N. J. Mason, Y. Itikawa, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **50**, 023103 (2021).