

## SF<sub>6</sub> 가스의 전자충돌단면적을 이용한 전자수송계수에 대한 몬테칼로 시뮬레이션

Monte Carlo Simulation of the Electron transport coefficients  
using Electron collision cross sections for SF<sub>6</sub> Gas

서 상현*	동국대학교 전기공학과
진 병훈	일본 게이요대학 전기공학과
하 성철	동국대학교 전기공학과

Sang Hyeon Seo*	Dept. of Electronic Eng., Dongguk University
Byoung Hun Chun	Dept. of Electronic Eng., Keio University
Sung Chul Ha	Dept. of Electronic Eng., Dongguk University

### Abstract

The electron transport coefficients in SF<sub>6</sub> gas is calculated and analysed for range of E/N values from 150~800(Td) by a Monte Carlo simulation, using a set of electron collision cross sections determined by the authors. The result of the Monte Carlo simulation such as electron drift velocity, ionization and electron attachment coefficients, longitudinal and transverse diffusion coefficients in nearly agreement with the respective experimental and theoretical for a range of E/N. The validity of the results obtained has been confirmed by a Monte Carlo simulation carried out parallel to the analysis.

### 1. 서론

SF<sub>6</sub>가스는 전기 절연 성능과 전류의 차단능이 우수한 특성을 가지고 있음으로서 각종 고전압기에 이용되고 있다. 그리고 최근에는 약전리 기체 플라즈마 프로세스의 에칭(etching)가스로서 또는 반도체 미세가공 분야 등에 널

리 이용되고 있다. 더욱이 절연 재료의 특성은 전자의 전리계수( $\alpha$ )와 부착계수( $\eta$ )에 의해서 기술되며 이들의 값은 전기 기기 설계에 귀중한 Data로 활용되고 있다. 따라서 이와 같은 절연 기체에 대한 전기 절연 내력의 향상을 위하여 그의 물성적특성을 명확히 규명할 필요가 있다고 본다. 전계중에서 기체는 방전 현상으로 전자군의 성질이 변화하게 되며 이것을 규명하기 위해서는 전자수송계수(전자군 파라미터) 즉 전자이동속도, 전리, 부착계수 및 종횡방향의 확산계수에 의해서 기술된다. 이와같은 전자수송계수를 해석하기 위해서는 정확한 운동량변환단면적, 여기 단면적, 전리 및 부착단면적이 필요하고 이들의 값을 이용하여 전자수송계수를 볼츠만 방정식과 몬테칼로 시뮬레이션에 의해서 구하여지고 있다<sup>(3,4)</sup>. 특히 몬테칼로법은 가스의 탄성 및 비탄성충돌을 고려한 비교적 높은 E/N(Td)영역의 범위에서 낮은 전리로 전자에너지 분포 함수와 전자군의 파라미터를 해석하는 가장 우수한 방법으로 현재 많은 연구자들에 의해 이용되고 있다.

이와같은 전자수송계수는 방전공간내에서 난수를 이용하여 전자의 운동을 각종 파라미터의 위치적 변동에 의해서 전자의 평균 에너지와 전자 밀도 및 시간의 함수로서 추적하여 해석

하는 것이다.<sup>(3,4,5)</sup> 이와 같은 이론은 최초 H. Itoh, T. Musha<sup>(1)</sup> (1960) 및 R.L. Thomas, R.W.G Thomas<sup>(2)</sup> (1969)에 의하여 전자사태에 의한 연구에 적용되었다. 즉 전자사태에서 나타나는 전체의 전자를 추적하여 전자기동속도 등 전자군파라미터의 동향을 조사하여 이들 전자의 물리량을 가상적으로 샘플링(Sampling)하고 그들 하전입자의 운동을 전자계산기로 추적하여 전자군의 수송계수를 확률적으로 결정하는 것이다.

본 연구에서는 SF<sub>6</sub>기체의 전기 전도 특성을 나타내는 전리계수 ( $\alpha/N$ ), 부착계수 ( $\eta/N$ ), 실효전리계수 ( $\bar{\alpha}/N$ ), 전자기동속도( $W$ ), 전자의 종횡방향의 확산계수 ( $ND_L, ND_T$ ) 등의 전자수송계수를 E/N(Td):150~800(Td) (E:전계, N:기체 분자수밀도, 1Td=1×10<sup>-17</sup> V·cm<sup>2</sup>, N:3.5353×10<sup>16</sup>cm<sup>-3</sup> 0°C 1Torr에 해당)의 범위에서 몬테칼로 시뮬레이션으로 계산하고 그 결과를 A.V. Phelps<sup>(6)</sup>, M. Hayashi<sup>(7)</sup>, Y. Nakamura<sup>(8)</sup>, Aschwanden<sup>(9)</sup>, M.S. Naidu<sup>(10)</sup>의 실험치와 비교 검토한다. 그리고 전자충돌단면적의 타당성에 대하여 검토하였다.

## 2. 시뮬레이션 방법

본 논문에서는 방전공간내에서 전자가 수송될 때 발생하는 전자 궤도운동의 계산, 충돌까지의 거리와 시간의 결정, 충돌 종류의 판정 및 충돌 후의 전자의 산란 방향의 결정과 전자에너지를 결정하는데 몬테칼로법을 사용한다.<sup>(4)</sup>

본 연구에서는 평행 평판 전극 사이에 초기 전자는 전계에 의하여 기체 분자와 충돌 전리로 발생한 전자가 전극에 흡수 또는 부착으로 전부 소실할 때까지를 몬테칼로법으로 추적하여 전자군파라미터를 구한다. 초기 전자는 시간 t=0에서 음극의 한 점에 존재하고 전계, 압력, 전자수, 최대 주기, 샘플링 및 난수 등이 주어진다. 그리고 기체 분자수 밀도는 N:3.5353×10<sup>16</sup>cm<sup>-3</sup>(0°C 1Torr)으로 하였고 전자-중성 기체 분자 사이의 충돌만을 고려하였고 하전입자의 상호간의 작용은 무시하였다. 그리고 기체 분자들 사이의 에너지 교환을 고려하지 않았으며 에너지 분포 함수는 Non-Maxwellian으로 가정하였다. 전자의 궤도 추적 방법은 H. Itoh,

T. Musha<sup>(1)</sup>의 것을 적용하였다. 전자는 포물선 궤도로 운동하며 SF<sub>6</sub>가스와 충돌하고 어떤 각도로 산란한다. 산란은 비등방성으로 가정한 전자의 충돌단면적을 이용하였고 충돌의 판정은 평균 자유 행정의 1/10로 계산하였다.

본 시뮬레이션에서는 T.O.F(Time of Flight) 샘플링에 의하여 다음의 물리량 즉 전자의 평균 이동이 음극과 양극 방향의 분해거리(ZZ), 위치를 분해한 sample, 그때 전자가 도달하는 시간(Time), 전자의 종방향의 거리 (R\*R), 전자의 횡방향의 거리 (D<sub>L</sub>T) 및 그 점의 전자에너지 등과 전자 궤도에서 전리가 일어난 경우에 2차전자 [NN(Tmax<sub>1</sub>을 20등분)], 난수(Random Number:13)등을 양극(콜렉터)에 도달할 때까지 반복 추적하였다. 그리고 FORTRAN77프로그램을 이용한 몬테칼로 시뮬레이션은 전자계산기 SPARC WORKSTATION (SS-20)을 사용하여 계산하였다.

## 3. 몬테 칼로법 (MCS)

몬테 칼로법은 난수(random number)를 취급하는 기법의 총칭이다. 불규칙적인 현상을 모델화하고 혹은 어떤 목적에 필요한 샘플을 추출할 때에 난수가 사용된다. 여기서 난수는 어떤 특정한 확률분포를 갖는 수열이며 전자계산기 내부에서 발생한 擬似亂數(Pseudo random number)를 반복이용하여 실험없이 실험결과를 구하는 실험적 수학의 한분야이다. 전자군의 성질을 조사하기 위한 몬테칼로법은 전자계내의 전자운동상태와 분자의 충돌산란확률을 고려하여 전자, 이온의 상태량을 추적하는 것을 기본으로 하여 입자를 확률현상의 난수로 모의하는 방법을 말한다. 또한 난수를 이용하여 충돌현상을 확률적으로 취급하고 사용한 난수를 계산기에 발생시켜 [0,1] 사이에 대응할때 독립한 난수열을 다수회 시행하여 평균치를 계산기로 구하는 것이다. 난수를 변수  $\theta$ 와  $d\theta$ 의 미소 범위에서 발생하는 확률을  $f(\theta)d\theta$ 로 나타내면 다음과 같이 식(1)으로 나타낸다.<sup>(3,4)</sup>

$$\int_0^{\theta} f(\theta)d\theta = r \quad \dots \dots \dots (1)$$

여기서 r은 0~1사이에 균일하게 분포되어 있는 난수이다. 그리고 난수를 만족시키는 조건과 발생법은 다수의 난수가 발생되어야하고 발생

된 난수의 주기는 충분히 길고 일정한 것으로 초기에 난수가 주어지면 발생한 난수의 수열은 일의적으로 정하고 통계적성질을 만족해야한다. 본 연구에서는 산술난수인 승적합동법으로 擬似亂數를 구하여 사용하고 승적합동법은 다음과 같은 난수발생법으로 나타낸다.<sup>(5)</sup>

$$Y_{k+1} = ar_k + c \pmod{m} \dots\dots\dots (2)$$

식(1)에 의해서 순차적으로  $r_1, r_2, r_3, \dots, r_k$ 를 발생시켜가는 방법이다. 여기서  $a, c, m$ 은 정의 정수이며 본 논문의 프로그램에서는 다음의 값을 이용하였다.

$$a : 1229, c : 351750, m : 1664501$$

이 경우에  $ar_k + c$ 를  $m$ 으로 나누어서 남은 나머지를 의미한다. 또한  $r_k$ 에 대해서는

$$S_k = r_k / m \dots\dots\dots (3)$$

으로 계산하면  $S_k$ 는 구간  $[0,1]$  사이의 일정한 분포의 난수가된다. 이 방법으로 발생한 난수  $r_k$ 는  $0 \leq r_k \leq m-1$ 를 찾아내어  $m$ 개를 생성하고 계속반복된다.

#### 4. 전자의 충돌단면적

본 연구에 이용한 SF<sub>6</sub>의 전자충돌단면적은 H. Itoh, etal<sup>(11)</sup>의 값을 그림(1)에 나타내었다.

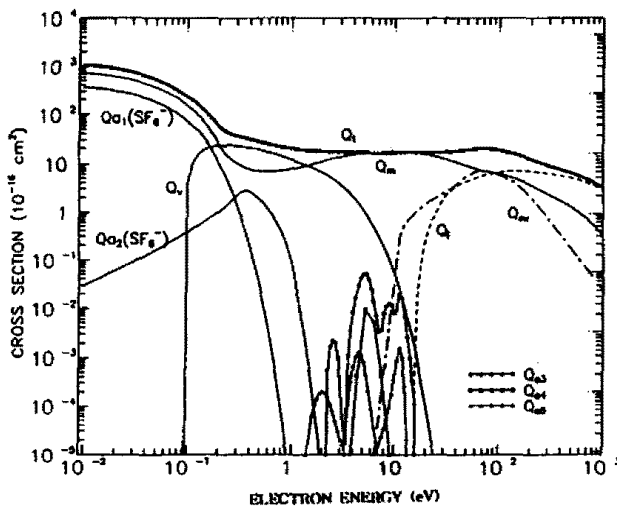


그림 1. SF<sub>6</sub>기체의 전자충돌단면적.

Fig 1. The collision cross sections of electrons in SF<sub>6</sub> gas.

이 SF<sub>6</sub>의 전자충돌단면적은 다른 원자, 분자에 비하여 매우 큰 전자부착단면적 ( $Q_{a1}, Q_{a2}$ )가 낮은 에너지영역에 존재하고 그의 Threshold에

너지은 각각 0.95(eV), 1.98(eV)의 값을 갖는다. 또한 해리성 부착단면적( $Q_{a3}, Q_{a4}, Q_{a5}$ )의 Threshold에너지의 값은 각각 3.29(eV), 3.95(eV), 1.57(eV)를 이용하였다. 그리고 탄성충돌에 의한 운동량변환단면적( $Q_m$ ), 여기단면적( $Q_{ex}$ ), 전리단면적( $Q_i$ ), 진동여기단면적( $Q_v$ ) 및 전 충돌단면적( $Q_T$ ) 등의 값은 그대로 이용하여 계산하였다.

#### 5. 시뮬레이션 결과 및 고찰

전자군 수송계수의 변화를 몬테칼로 시뮬레이션을 통하여 고찰하였다.

그림(2)의 전자기동속도 ( $W$ )는  $E/N=150 \sim 800$  (Td), 범위에서 MCS법으로 계산하고 그 결과를 A.V. Phelps<sup>(6)</sup>, M. Hayashi<sup>(7)</sup>, Y. Nakamura<sup>(8)</sup>의 실측치와 비교하여 나타낸 것이다.

전자에너지 분포함수와 탄성, 비탄성충돌단면적을 이용하여 계산된 전자기동속도는  $E/N$ (Td)의 증가에 대하여 거의 선형적으로 증가하고 본 연구에서는 Y. Nakamura<sup>(8)</sup>의 2중 서터드리프트 튜브를 이용하여 측정된 평균 도착시간이 동속도의 값과 거의 일치하였다. 따라서 전자기동속도의 계산값에 대응하는 전자충돌단면적의 타당성을 검토하였다.

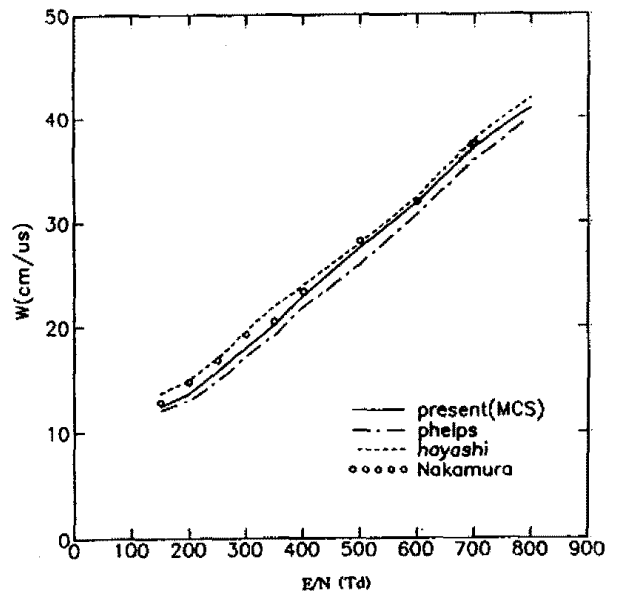


그림 2. SF<sub>6</sub>기체중에서의 전자기동속도.

The drift velocities of electrons in SF<sub>6</sub> gas.

또한 전계로부터 에너지를 얻은 전자가 미소 거리를 이동하는 동안에 충돌전리확률은 평균 자유행정에 의해 나타내며 이것은 압력에 반비례하므로 낮은 기압에서 전자에너지는 크므로 전자이동속도는 증가하는 것으로 생각된다.

그림 3~5에 전리계수 ( $\alpha/N$ ), 부착계수 ( $\eta/N$ ), 실효전리계수 ( $\bar{\alpha}/N$ )를  $E/N:150\sim 800(\text{Td})$ 의 함수로 나타내었다. 본 연구의 계산결과는 A.V. Phelps<sup>(6)</sup>, M. Hayashi<sup>(7)</sup>의 실험치와 같은 경향으로 증가하지만 Aschwanden<sup>(9)</sup>의 실측값은 거의 일치한 값을 나타내었다.

$Q_{a1}$ ,  $Q_{a2}$ 는 부착단면적의 절대값이 크기 때문에  $E/N(\text{Td})$ 이 낮은 영역에서 전자의 운동에너지는 감소하여 전리는 저하되고  $E/N(\text{Td})$ 가 높은 영역에서는 전자의 운동에너지가 전리에너지보다 크게되어 전리는 증가된다고 생각된다.

전리에 의하여 발생한 전자는  $\text{SF}_6$ 기체분자에 부착하여 부이온을 형성하므로 부이온은 전자에 비하여 질량이 크고 기체중에서 전계의 가속을 받더라도 높은 에너지 상태에 도달하기가 힘들고 전리능력이 없기 때문에 낮은  $E/N(\text{Td})$ 에서 전자부착계수는 증가하고 높은  $E/N(\text{Td})$ 의 영역에서는 감소하는 경향을 나타내었다.

실효전리계수  $\bar{\alpha}/N=(\alpha-\eta)/N$ 이 부(-)의 값으로 나타나는 범위는  $E/N:150\sim 250(\text{Td})$ 로 나타났으며 Aschwanden<sup>(9)</sup>의 실험치와 A.V. Phelps<sup>(6)</sup>, M. Hayashi<sup>(7)</sup>의 계산값과 거의 일치한 경향

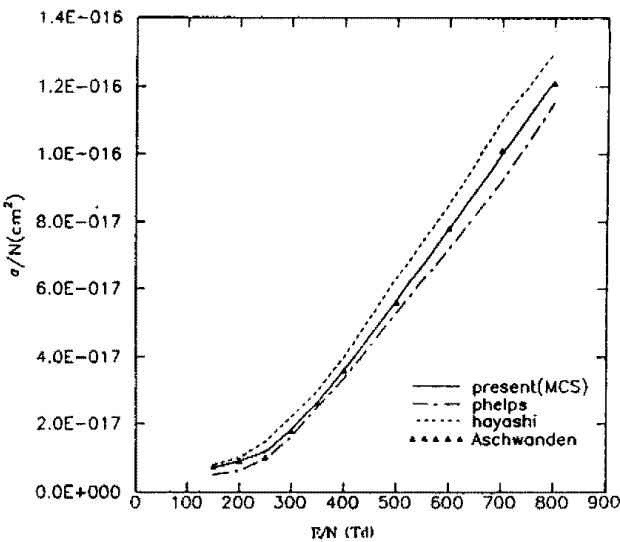


그림 3.  $\text{SF}_6$ 기체중에서의 전리계수.

Fig 3. The ionization of coefficients in  $\text{SF}_6$  gas.

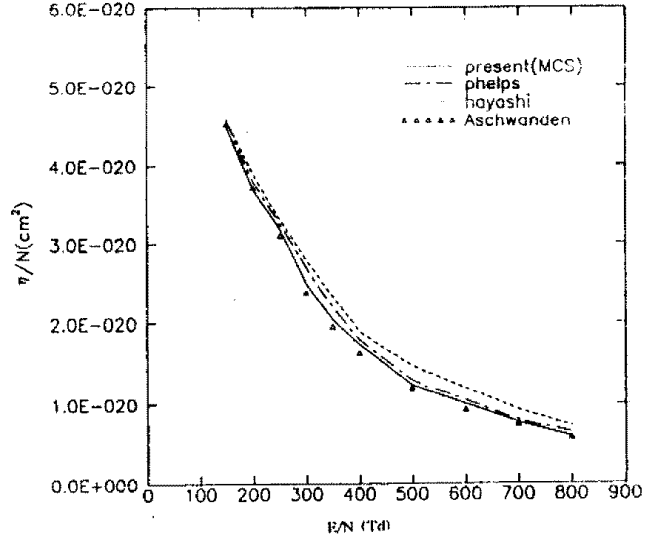


그림 4.  $\text{SF}_6$ 기체에서의 부착계수.

Fig 4. The attachment coefficients in  $\text{SF}_6$  gas.

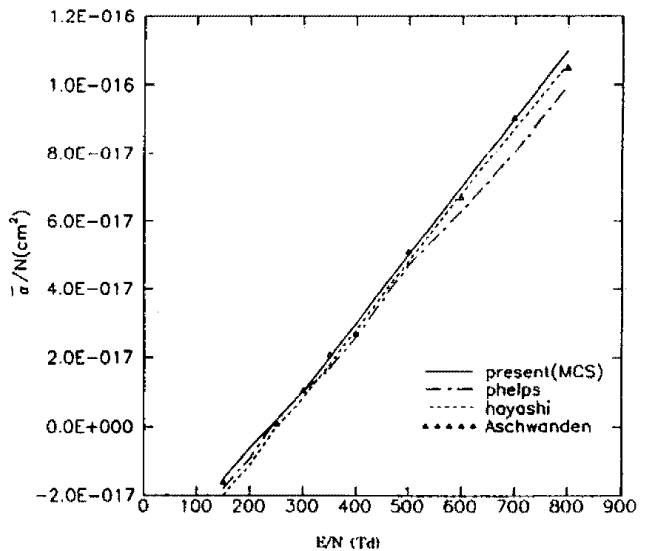


그림 5.  $\text{SF}_6$ 기체에서의 실효계수.

Fig 5. The effective coefficients in  $\text{SF}_6$  gas.

을 나타냈다.

그림 6의 종방향확산계수는 가스분자수 밀도와 적  $ND_L$ 을  $E/N(\text{Td})$ 의 함수로 나타내었다. 본 연구에서는 H. Itoh 등의 전자 충돌단면적을 이용하여 계산한  $ND_L$ 의 결과와 Aschwanden<sup>(9)</sup>의 측정치와 거의 같은 결과를 나타내었다.

그림 7의 횡방향 확산계수는 가스분자수 밀도와 적  $ND_T$ 를 M.S. Naidu<sup>(10)</sup>의 측정치와 비교하였다.  $ND_T$ 는  $E/N(\text{Td})$ 의 증가에 따른 의존성이 크게 작용하지 않음을 알 수 있다.  $\text{SF}_6$ 가스 중의 전자확산계수는 전리, 부착계수 및 이동속

도의 영향으로 하전입자밀도의 공간적구배와 전계가 공존하는 공간내에서 하전입자의 거시적운동이 일어나지않고 평형상태의 균일한 밀도분포를 나타낸 것으로 생각된다.

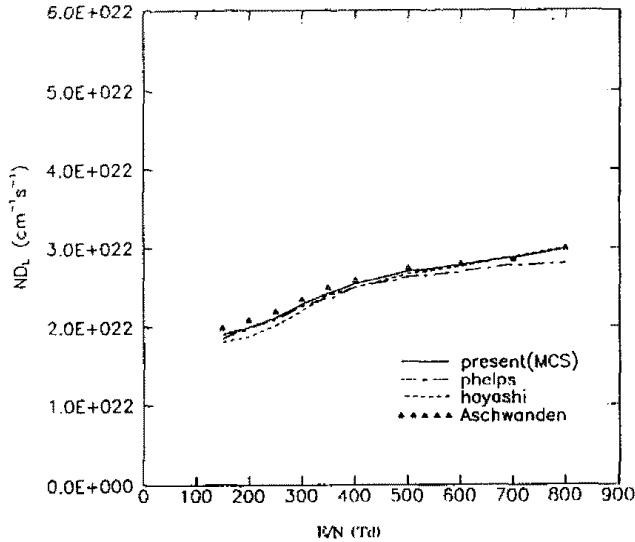


그림 6. SF<sub>6</sub>기체에서의 종방향확산계수.  
Fig 6. The longitudinal diffusion coefficients in SF<sub>6</sub> gas.

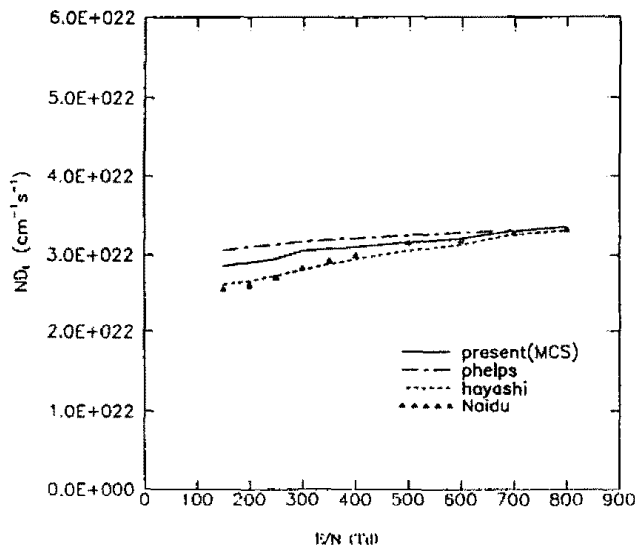


그림 7. SF<sub>6</sub>기체에서의 횡방향확산계수.  
Fig 7. The transverse diffusion coefficients in SF<sub>6</sub> gas.

## 6. 결론

SF<sub>6</sub>가스의 전자충돌단면적을 이용하여 150 ≤ (E/N) ≤ 800범위에서 전자군의 수송계수를 몬테

칼로 시뮬레이션으로 계산하였다. 그리고 이들의 계산치와 A.V. Phelps<sup>(6)</sup>, M. Hayashi<sup>(7)</sup>, Y. Nakamura<sup>(8)</sup> 및 Aschwanden<sup>(9)</sup> 실험치와 비교 해석하고 전자충돌단면적의 타당성에 대하여 검토하였다. 실효전리계수, 전리계수, 전자부착계수 및 종방향확산계수는 Aschwanden<sup>(9)</sup>의 측정치와 거의 일치한 값을 얻었다. 또한 종방향확산계수는 M.S. Naidu<sup>(10)</sup>의 실측치와 일치한 경향을 나타냈으며 E/N(Td)의 증가에 따라서 전자이동속도는 Y. Nakamura<sup>(8)</sup>의 실측치와 거의 일치하였다.

## 7. 참고문헌

1. H. Itoh and T. Musha "Monte Carlo Calculations of Motions in Helium" J.Phys. soc. Japan, Vol.15, No.9, PP.1675-1680, (1960)
2. R.W.L. Thomas, and W.R.L. Thomas, "Monte Carlo Simulation of electrical discharge in gases", J. Phys. B. Vol.2, PP. 562-570, (1969)
3. 몬테카를로법과 시뮬레이션(培風館)(1989)
4. 氣體放電 시뮬레이션技法 (제 140호) (1974)
5. 森 正武. "Fortran 77 數値計算 프로그래밍" (岩波書店) PP 41-44, (1995)
6. A.V. Phelps and R.J. Van Brunt "Electron-transport, ionization, attachment and dissociation, coefficients in SF<sub>6</sub> and its mixtures", J. Appl. Phys. 64, 4269-77, (1988)
7. M. Hayashi, and S. Hara, "Joint Symposium on Electron and Ion Swarm and Low Energy Electron Scattering", (A Satellite of ICPEAC XVII) (Gold Coast, Australia)" Proc PP 109-11, (1991)
8. Y. Nakamura "Transport coefficients of electrons and negative ions in SF<sub>6</sub>",

- J. Phys. D: Appl. Phys. 21, 67-72, (1988)
9. Aschwanden Th "Gaseous Dielectrics IV ed", L G Christophorou and M O pace (New York: Pergamon) PP 24-33, (1984)
10. M.S. Naidu and A.N. Prasad "Diffusion and drift of electrons in SF<sub>6</sub>", J. Phys. D: Appl. Phys. 5, 1090-5, (1972)
11. H. Itoh, Y. Miura, N. Ikuta, Y. Nakao and H. Tagashira, "Electron swarm development in SF<sub>6</sub> : 1. Boltzmann equation analysis", J. Phys. D: Appl. Phys. 21, 922-30, (1988)