

열자격전류곡선의 경사에 의한 활성화에너지의 수치해석

A Numerical Analysis of Activation Energy by a Slope of TSC Curve

김기준* 시립인천전문대학 제어계측과
 김상진 시립인천전문대학 제어계측과
 송자윤 시립인천전문대학 제어계측과

Ki-Joon, Kim Department of Control & Instrument Engineering
 Junior College of Inchon

Sang-Jin, Kim Department of Control & Instrument Engineering
 Junior College of Inchon

Ja-Youn, Song Department of Control & Instrument Engineering
 Junior College of Inchon

Summary

It was investigated the properties of TSC (Thermally Stimulated Current) to understand carrier's behavior from long ago. Activation Energy of their properties is very important to verify electrical characteristics. So, for many years, many researchers were worked to get the activation energy, more completely. But, if boundary conditions were not satisfied, the values of activation energy contained several errors. In this work, to obtain the activation energy related to charged particles, the peak temperature T_p and the slope of tangential line on any coordinates of Arrhenius plot are applied. The calculation process can be dealt with by computer, and the result of observation shows that the curves of calculation data and simulation data coincide very completely.

1. 서론

열자격 전류로부터 활성화 에너지를 구하는 방법은 Garlick과 Gibson이 제안한 초기 상승법을 비롯하여 Grossweiner 방법, Lusich 방법,

Hearing과 Adams 방법, 전면적 방법, 서멀 샘플링법 등 많은 방법이 연구되어져 왔다^[1,2,3]. 각 방법은 실시 조건에 따라서 간편하고 정확하게 활성화 에너지를 구할 수 있지만 만약 조건이 만족되지 않은 경우에는 많은 오차를 함유하는 것으로 보고되고 있다^[4]. 따라서 본 연구에서는 열자격 전류의 기초 방정식을 계산기로 직접 계산함으로써 활성화 에너지의 값을 평가하기 위한 방법과 계산 결과값의 정확성을 유도하기 위하여 열자격 전류 곡선의 재구현에 의한 검증 방법을 제안하였다.

2. 활성화 에너지를 구하기 위한 수치 해석

단일 캐리어 트랩을 근거로 한 1차의 열자격 전류 이론에서 그 기본 방정식은

$$I(T) = I_0 \exp \left\{ -\frac{E_t}{kT} - \frac{\nu}{\beta} \int_{T_0}^T \exp \left(\frac{E_t}{hT} \right) dT \right\} \quad (1)$$

로 표시된다^[3,5,6].

여기서 $I_0 = n_0 e \mu \nu \tau A E$ [A], n_0 는 캐리어 밀도, e 는 전자의 전하량, μ 는 캐리어 이동도, τ 는 완화 시간, A 는 전극 면적, E 는 형성 전계, k 는 볼츠만 상수(8.617×10^{-5} eV/K), T 는 절대 온도,

T_0 는 승온 개시 온도[K], ν 는 이탈 주파수 인자, E_i 는 활성화 에너지, 그리고 β 는 승온 속도이다.

(1)식의 경사를 이용하기 위하여 \ln 을 취한 후 미분한 결과를 수치 해석적으로 처리하면

$$DLNI(I) = -ET/K + NU/BETA/INVT(I) * EXP(-ET*INVT(I)/K) \quad (2)$$

가 된다. 여기서 ET 는 활성화 에너지, NU 는 ν , $Beta$ 는 β , K 는 볼츠만 상수, $INVT(I)$ 는 $1/T_i$ 이다.

이때 (1)식의 결과는 그림 1에서와 같이 열자격 전류 곡선의 아레니우스 플롯상의 임의 1좌표점에서 접선의 기울기(경사)를 의미한다. 따라서, 곡선의 최대값(피크 온도: T_{PEAK})을 고려한 경우에 (1)식의 값은

$$NU/BETA = ET/K * T_{PEAK} ** 2 * EXP(ET/K * T_{PEAK}) \quad (3)$$

이 되기 때문에 (3)식을 다시 (1)식에 대입하여 정리하면

$$DLNI(I) = -ET/K * [1 - (T(I)/T_{PEAK}) ** 2 * EXP(ET(T(I) - T_{PEAK}) / (K * TI(I) * T_{PEAK}))] \quad (4)$$

로 된다.

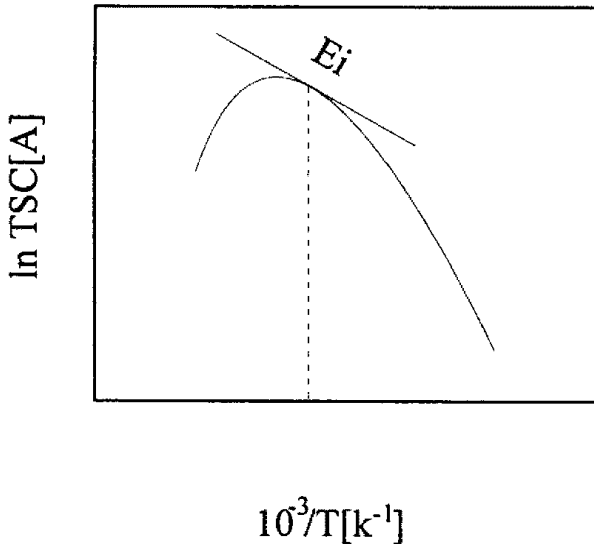


그림 1. 1차의 TSC 이론 곡선의 아레니우스 플롯

따라서 (4)식 중에 포함되어 있는 활성화 에너지의 값을 구하면

$$ET = -DLNI(I) * K / (1 - (T(I)/T_{PEAK}) ** 2 * EXP(-ET/K * TI(I) * (1 - (T(I)/T_{PEAK}) ** 2))) \quad (5)$$

로 된다. (5)식의 양변에 포함된 활성화 에너지의 값은 처음에 임의로 설정하여 i 번째와 $i-1$ 번째의 차이가 미리 설정한 오차 한계 미만으로 수렴할 때를 참값으로 취하여 정한다.

3. 실험 결과의 적용 및 검증

열자격 전류식의 경사를 이용한 활성화 에너지의 계산 과정을 실험 결과에 적용하기 위하여 열자격 전류 측정이 수행되었다. 사용 시료는 Kureha Chemical(日)사 제품인 2축 연신된 PVF₂ 필름으로서 측정 방법은 형성 전계 1[MV/m]~10[MV/m]로 변화시켜 인가하면서 -100[°C]까지 급냉한 일렉트렛트로부터 5[°C/min]로 승온시키면서 열자격 전류를 측정하였다. 측정 결과 중 그림 2에서와 같이 -35[°C] 부근에서 나타난 β 피크를 중심으로 본 연구를 적용하였다.

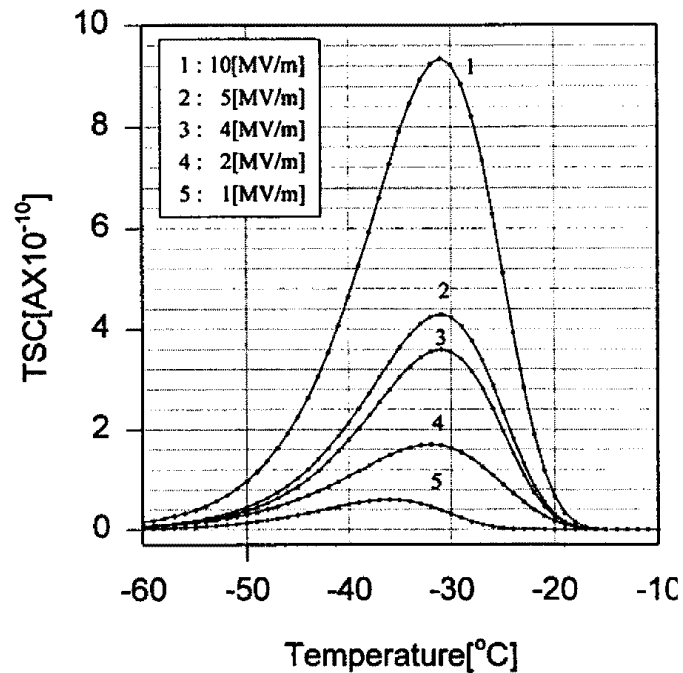


그림 2. 형성 전계별 TSC 곡선(β 피크)

형성 전계별로 나타난 열자격 전류 곡선을 살펴보면 대부분의 피크는 -27[°C] 부근에서 나타나고 있으며 형성 전계가 1[MV/m]인 경우에는 -35[°C] 부근에서 형성되었다. 활성화 에너지의

계산은 실제적으로 피크 온도와 임의 온도에서의 열자격 전류값인 2점간의 경사로 구하여진다. 열자격 전류값의 간격을 1[K]로 하여 계산한 결과는 그림 3과 같이 계산되었다. 이때 피크점 부근에서 계산된 활성화 에너지의 값은 급격하게 감소하고 있으며 상승 부분에서는 고른 분포를 보이고 있다.

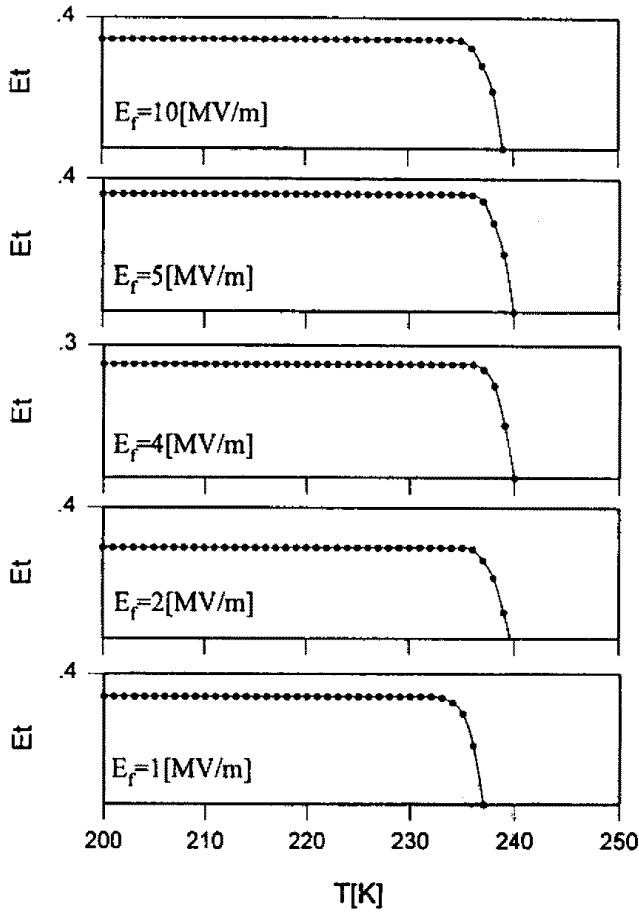


그림 3. 계산된 활성화 에너지값의 분포

피크점 부근에서 계산된 활성화 에너지의 값이 급격하게 감소하는 이유는 이상적인 경사에 비하여 피크 온도와 피크점 부근에 있어서 임의의 한점인 열자격 전류값에서 얻은 경사가 너무 작기 때문인 것으로 사료된다. 이것은 아레니우스 플롯 상에 있어서 열자격 전류 곡선의 피크 좌표값보다 상당히 전류값이 작은 영역에서의 활성화 에너지는 직선적으로 배열되어 있으므로 경사를 산출할 때의 오차는 작아지게 된다. 그러나 피크

점 부근에서의 경사는 크기 때문에 오차가 크게 발생된다. 이러한 피크 부분에서의 오차를 줄이기 위하여 (5)식에 의하여 활성화 에너지가 계산될 때 피크 온도값을 중심으로 하여 $E_a(i) - E_a(i-1)$ 의 값이 평균 계산값의 10% 이상의 오차값을 갖는 것으로 값으로 계산될 때는 전체 계산에서 제외하는 것으로 수치 처리하여 계산하였다. 이러한 수치 계산에 의한 최종 결과는 그림 4와 같이 도시되었다.

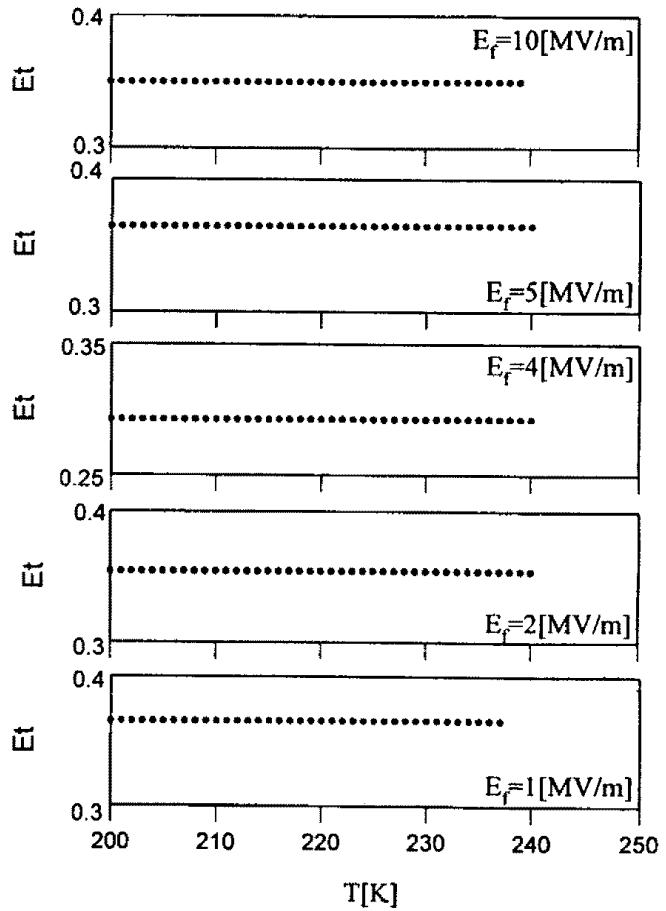


그림 4. 최종 수치 처리 결과

이상과 같은 과정에 의하여 계산된 결과값을 확인하기 위하여 계산된 활성화 에너지에 의하여 열자격 전류값을 재구성하였다. 이때 계산 결과를 비교하기 위하여 그림 5와 같이 활성화 에너지의 값을 $\pm 2\%$ 정도로 계산하여 도시된 곡선과 비교하였다. 도시 결과 10[MV/m]인 경우에 계산된

활성화 에너지의 값이 1.16으로 크게 가정된 경우에는 원래의 곡선보다 곡선 너비가 약간 넓게 나타났으며, 1.12로 가정한 경우는 약간 좁게, 그리고 1.14로 정확하게 계산된 결과는 원래의 열자극 전류 곡선과 잘 일치하고 있다. 또한, 활성화 에

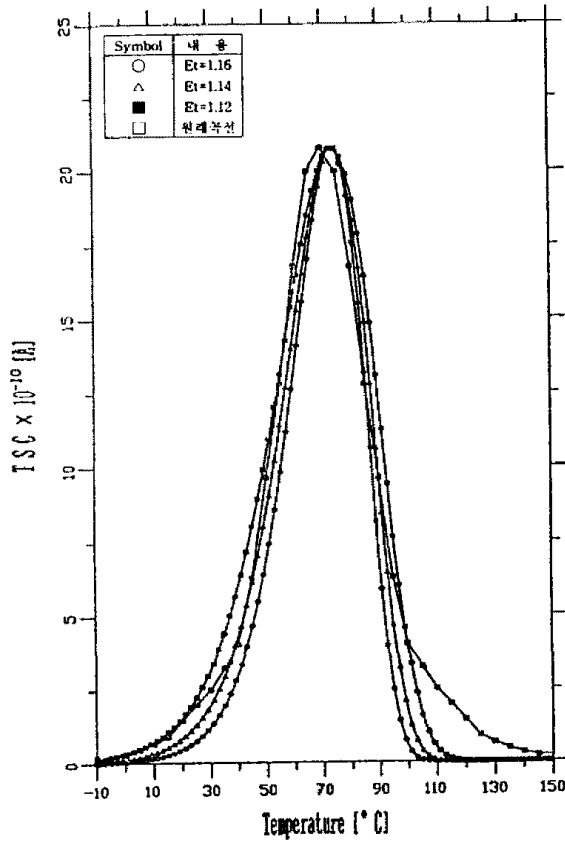


그림 5. 활성화 에너지에 따라 재구현된 TSC 곡선

너지의 값을 더욱 크게 가정하였을 때 열자극 전류 곡선은 더욱 넓게 도시되었으며, 활성화 에너지의 값을 더욱 작게하였을 때는 열자극 전류 곡선은 좁게 도시되었다. 따라서, 이러한 결과는 활성화 에너지의 계산 결과를 열자극 전류 곡선으로 재구현하여 보다 정확한 계산 결과를 유도할 수 있었다.

4. 결론

본 연구에서는 열자극 전류의 기초 방정식을 계산기로 직접 계산하므로써 활성화 에너지의 값을 평가할 수 있었으며 주요 결론은 다음과 같다.

- 열자극 전류 곡선상의 임의의 좌표를 이용하여 계산이 가능하였으며 피크 전류 및 임의의 곡선상의 전류값에 제한을 받지 않는다.
- 계산값을 확인하기 위하여 활성화 에너지값에 따른 열자극 전류 곡선의 재구현에 따라 정확성을 확인할 수 있었다.
- 활성화 에너지의 값을 수치 해석 기법에 의하여 처리함에 따라 여러 가지 물성량도 동시에 계산되어질 수 있다.

Reference

- [1] J. G. Simmons and G. W. Taylor, "High-Field Isothermal Currents and Thermally Stimulated Currents in Insulators having Discrete Trapping Levels", Physical Review B, Vol. 5, No. 4, pp.1619~1629(1972)
- [2] R. A. Creswell and M. M. Perlman, "Thermal Currents from Corona Charged Mylar", J. Appl. Phys., V. 41, No. 6, pp.2365~2375(1970)
- [3] R. Chen, "On the calculation of Activation Energies and Frequency Factors from Glow Curves", J. Appl. Phys., Vol. 40, No. 2, pp.570~585(1969)
- [4] S. Maeta and F. Yoshida, "On the Determination of the Trap Depths from Thermally Stimulated Current II," Jap. Journal of Appl. Phys., Vol. 28, No. 9, pp.1717~1727(1989)
- [5] K.J. Kim, S.H. Park, C.H. Kim, and J.U. Lee, "Error Correction of the Activation Energy of TSC by using a Asymptotic Estimation Method," KIEEME 추계 학술대회 논문집, pp.118~122(1992)
- [6] 電氣學會, "電氣絶緣材料 熱刺激電流", 電氣學會技術報告, No. 194, 1985