

### 볼츠만 방정식을 이용한 Helium 가스의 전자군 파라미터 시뮬레이션

하성철, 송병두\*, 김대연  
동국대학교 전기공학과

#### The simulation of electrons swarm parameter in He gas is used by Boltzman equation

Byoung-Doo, Song\*, Sung-Chul, Ha, Dea-youn, Kim.  
Dep. of electrical engineering Dongguk University.

#### ABSTRACT

This paper is calculated at electron swarm simulation by Back Prolongation of Boltzmann equation for range of E/N values from 0.1~200[Td], pressure P=1.0[Torr], temperature T=300[ °K], the electron swarm parameter(drift velocity, longitudinal · transverse diffusion coefficients, characteristic energy, etc) in He gas is used by electron collision cross section, particularly explicate the simulation technique, and cosider electrical conduction characteristic of He gas.

**Key words (중요용어) :** MCS(Monte Carlo Simulation), BEq(Boltzmann Equation), Electron collision cross section (전자 충돌 단면적)

### 1. 서 론

진리기체는 대단히 많은 하전입자와 중성분자, 원자로 구성되며 전자, 이온 등의 하전입자와 중성기체원자 또는 분자가 공존할 때에는 이들 하전입자 상호간의 충돌작용에 의하여 이동, 확산 등의 거시적 현상이 나타난다. 이들의 현상들을 정량적으로 해석하기 위해서는 충돌현상과 전자에너지 분포함수가 기초가 되며 이에 대한 이론적, 실험적 연구가 활발히 이루어져왔다. 그러나 이들 응용분야의 확충과 효율개선 및 물성적 현상의 명확한 규명을 위하여 면밀한 연구가 요구되고 있다. 전계중에 존재하는 기체는 방전플라즈마 현상으로 전자군의 성질이 변화하게 되므로 이것을 해석하기 위해서는 전자군 파라미터를 파악하는 것이 무엇보다 중요하며, 원자, 분자와 전자의 충돌에 관한 연속적인 반응에 있어서 약전리 플라즈마의 특성을 이해하는 것은 플라즈마의 상세한 모델을 설정하는데 중요하다.<sup>1) 2)</sup> 따라서 이들에 관한 연구는 고속 컴퓨터의 성능향상과 수치적 해석방법의 정교함으로 인하여 정확하고 신뢰성이 높은 영역까지 전자군 파라미터의 연구가 진행되고 있다. 특히 He 기체를 포함한 혼합기체 중에서의 전자수송특성과 에너지분포함수에 관한 연구는 전기적 절연내력과 소호특성의 질적 향상, 각종 고전압기기의 적용가능성 및, 반도체 제조용 기체 Plasma

etching 공정, CVD (Chemical Vapor Deposition)에 의한 박막형성, 초 LSI용 절연막 등에 공업적으로 폭넓게 이용 발전되고 있다<sup>6)</sup>. 그러므로 이것을 해석하기 위해서는 전자기동속도, 종축확산계수, 횡축확산계수, 종축확산에너지, 횡축확산에너지, 전리계수 및 평균에너지를 파악하는 것이 필요하다. 본 논문에서는 He가스의 절연내력특성과파악을 목적으로 T=300[ °K], E/N=0.1~200[Td], P=1.0 [Torr]범위 내에서 BEq법을 이용하여 시뮬레이션 하였다.<sup>3)4)</sup>

### 2. 본 론

#### 2.1 BEq와 시뮬레이션 방법

볼츠만 방정식(이하 BEq)는 어느 위치에 있는 속도를 가진 전자수밀도가  
1) 위치의 변화에 동반하는 수치  
2) 전계에 따른 가속에 의한 속도변화에 근본한 수치  
3) 충돌에 의한 속도변화에 의한 수치  
의 3가지의 수치에 의해 시시각각 변화하고 있는 것을 나타내는 것이다.  
기체중의 방전현상은 상호 충돌을 되풀이하는 하전입자, 즉, 전자, 원자, 분자, 이온에서 성립되며,

이들 하전입자는 전자군의 속도와 위치 및 시간에 따라 분류할 수 있는데, 하전입자가 열평형상태에 있는 경우를 제외하고는 전자의 운동 중 충돌에 의한 임의의 속도와 임의의 위치에 있는 전자의 수가 시간에 따라 변화한다.

하전입자 각각의 속도는 각각 다른 시간  $t$ 와 더불어 변화하므로 일반적으로 위치공간과 속도공간을 일치시킨 위상공간과 분포함수 개념을 도입하여 위치벡터  $\vec{r}=(x, y, z)$  속도벡터  $\vec{v}=(v_x, v_y, v_z)$  시간을  $t$ 로 놓았을 때, 전자의 위치  $\vec{r}=(\vec{r}+d\vec{r})$  속도  $\vec{v}=(\vec{v}+d\vec{v})$  범위에 있는 미소공간에 존재하는 입자수를  $dn$ 이라 하면,

$$dn = f(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{r} \cdot d\vec{v} \quad \text{식(1)}$$

로 나타낼 수 있다.

외부전계가 인가된 기체중의 전자의 분포함수  $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ 는 다음의 볼츠만 방정식의 해로서 나타내어진다.

$$\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\partial \vec{r}} + \frac{eE}{m} \frac{\partial f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\partial v} = \left[ \frac{\partial f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\partial t} \right]_{coll} \quad \text{식(2)}$$

위 식의 물리적 의미를 살펴보면 좌변의 제 1항은 분포의 시간에 따른 변화를 나타내는 항이고, 제2항은 입자의 운동에 의한 확산, 제3항은 외력, 우

변은 충돌항을 의미한다. 제3항의  $\frac{eE}{m}$ 는 전자가 외부전계에 의해서 움직이는 가속도이다. 또한 전자군의 임의의 위치와 속도 및 시간을 갖는 전자 수 밀도는 위치변화에 따른 밀도와 전계의 속도 변화에 의한 밀도 그리고 충돌로 나타나는 속도 변화에 따른 밀도의 변화로 나타낼 수 있다는 것이다.

BEq에서는 개개의 입자수를 추적하는 MCS와 달리 처음에 다수의 입자수를 포함한 전자흐름을 취급하는 것으로 충돌의 확률적 성질을 기초로한 swarm 발달의 통계변동은 표현하고 있지 않다. 그러나 취급해온 많은 식에 의존하기 때문에 swarm의 행동에 대한 연역적인 통제가 가능하여 계산시간도 비교적 짧다. 통계적 변동이 표현되고 있는 것은 오히려 잇점이 되고 있다. 이와같은 이유에서 충돌 단면적에서 swarm-parameter를 구하는 방법으로 BEq법은 현재 많이 사용하는 방법이다.

전자군 수송특성의 기본계산식은 기체방전 시뮬레이션 기법을 이용하였다.

## 2.2 전자 충돌 단면적

충돌 단면적은 전자의 거시적 특성을 이용하는 데 기초적 자료로서 중요하다. 가스결연에서 비평형 플라즈마 응용기술에 이르기까지 각각의 경우에 필요한 가스의 종류, 상태조건( $E/N$ ), 가스밀도, 여

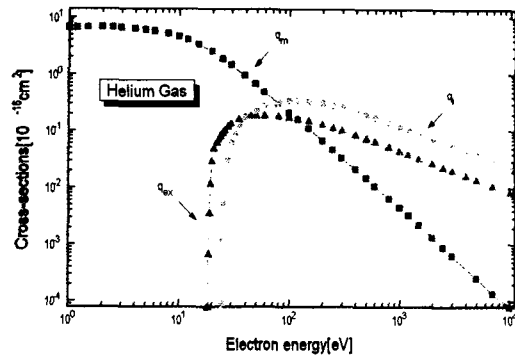


그림 1. He 가스의 충돌단면적

Fig 1. The collision cross section of electrons in He gas

기조건)을 파악할 수 있으며 전자수송특성에 관한 정보를 알 수 있다<sup>(2)</sup>. 절연가스로는 여러 단면적에서 전리단면적( $q_i$ )과 부착단면적( $q_a$ )이 중요하며 예칭가스로는 여기단면적( $q_{ex}$ )과 해리단면적( $q_d$ )이 중요하다.<sup>(7)(8)</sup> 또한 기체분자에 대한 전자의 충돌 단면적은 전자의 에너지에 의해서 변화한다. 따라서 충돌 입자간의 상호작용으로 기체분자의 여기, 해리, 이온화 등의 반응으로 여기단면적, 해리단면적, 이온화단면적 등으로 나타내며 전충돌 단면적은 개개의 반응과정의 합으로 나타낸다. 본 연구에 이용한 He의 전자충돌 단면적[그림1]은 운동량 변환 단면적( $q_m$ ), 전자 여기 단면적( $q_{ex}$ ), 전리 단면적( $q_i$ )으로 구성되어 있다.

## 2.3 결과 및 고찰

### 2.3.1 전자 이동 속도

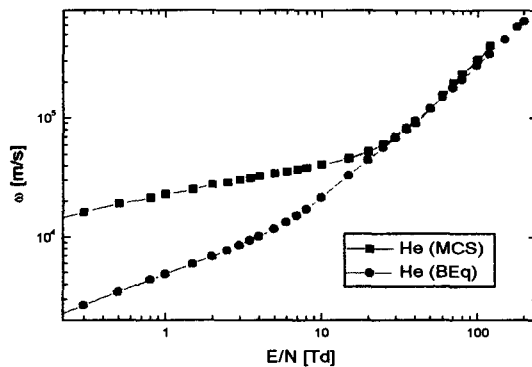


그림 2. He 가스의 전하이동속도

Fig 2. The drift velocity of electrons in He gas

[그림2]의 전하이동속도 ( $\omega$ )는  $E/N=0.1 \sim 200$ [Td] 범위에서 압력  $P=1.0$ [Torr]에 대하여 몬테

칼로 시뮬레이션 법으로 계산한 결과와 볼츠만 방정식 법으로 계산한 결과를 서로 비교한 것이다. 전자에너지 분포함수와 탄성, 비탄성 충돌단면적을 이용하여 계산된 전하이동속도는  $E/N$ [Td]의 증가에 대하여 거의 선형적으로 증가하고 낮은  $E/N$ 값에서는 다소 차이가 있으나 높은  $E/N$ 값에서는 그 값이 거의 일치하는 것을 보여준다. 또한 전계로부터 에너지를 얻은 전자가 미소거리를 이동하는 동안에 충돌 전리확율은 평균 자유행정에 의해 나타내며 이것은 압력에 반비례하고 전계에 비례하므로 낮은 기압, 높은 전계에서 전자에너지는 크므로 전하이동속도는 증가하는 것으로 생각된다.

### 2.3.2 종·횡측 확산계수

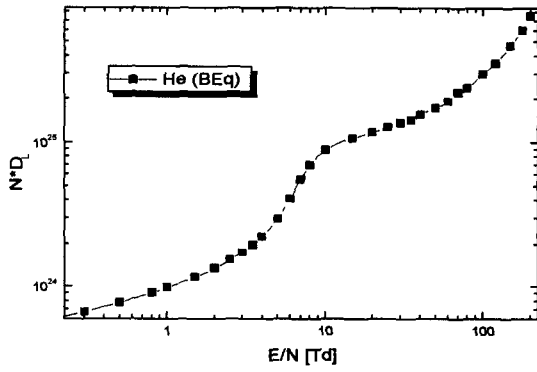


그림 3. He 가스의 종방향 확산계수

Fig 3. The longitudinal diffusion coefficients in He gas

[그림3]의 종측확산계수는 기체분자수밀도( $N$ )와  $E/N$ 의 곱  $ND_L$ 을  $E/N$ [Td]의 함수로 나타내었다. 여기서  $ND_L$ 은  $E/N$ [Td]의 증가에 따른 의존성이 크게 작용하고 있음을 알 수 있다.

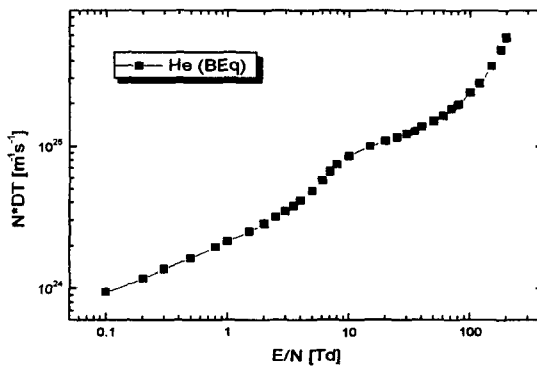


그림 4. He 가스의 횡방향 확산계수

Fig 4. The transverse diffusion coefficients in He gas

[그림4]의 횡측확산계수는 기체분자수 밀도와 곱  $ND_T$ 를 마찬가지로 방법으로 서로 비교하여 나타내었다.

### 2.3.3 종·횡방향 특성 에너지

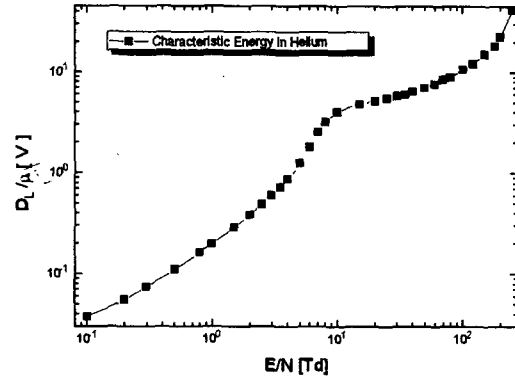


그림 5. He 가스중의 종방향 특성에너지

Fig 5. The longitudinal characteristic energy in He gas

[그림5]은 He 가스중의 종방향 확산계수와 이동도의 비 즉, 종방향 특성에너지( $D_L/\mu$ )를  $E/N=1.0 \sim 60$  [Td] 변화에 따라 나타낸 것이다. 여기서  $\mu = W/E$ 로서 이동도를 나타낸다. 그림에서 나타난 바와 같이  $E/N$ [Td] 0.1에서  $\sim 10$ 까지 증가하다 이후 증가세가 둔화되었으나 100이후로 다시 증가하는 추이를 보여주고 있다.

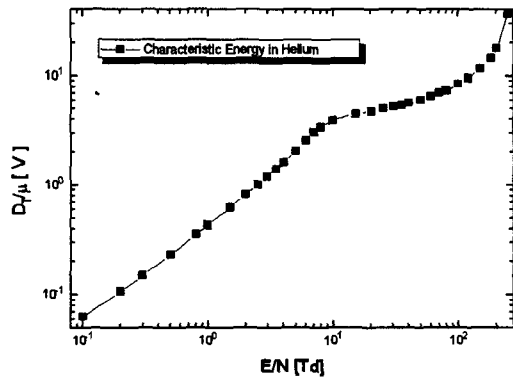


그림 6. He 가스중의 횡방향 특성에너지

Fig 6. The transverse characteristic energy in He gas

[그림6]은 횡방향 확산계수와 이동도의 비율 나타내는 횡방향 특성에너지를 위와 같은 방법으로 나타낸 것이다. 여기서도  $E/N$ [Td] 0.1에서  $\sim 10$ 까지 증가하다 이후 증가세가 둔화되었으나 100이후로 다시 급격히 증가하는 추이를 보여주고 있다.

### 2.3.4 전리계수

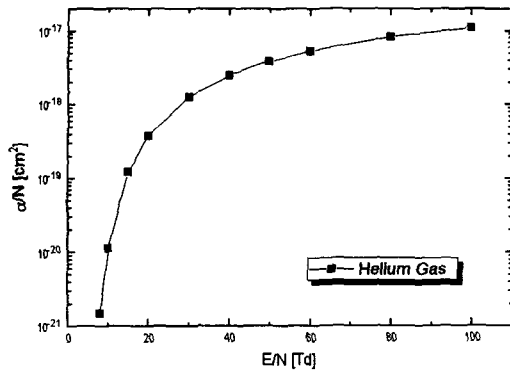


그림 7. He 가스의 전리계수  
Fig 7. Ionization coefficients in He gas

[그림7]에 나타난 바와 같이 E/N값이 적을 때는  $\alpha/N$ 이 급속히 증가하고 E/N값이 클 때에는  $\alpha/N$ 이 서서히 증가한다. 이와 같은 현상은 전자의 에너지가 증가하면 충돌할 때 상호작용시간이 너무 짧기 때문에 전리하기가 어렵기 때문이다. 기체 방전현상 중에서 가장 중요한 전리과정은 전자충돌에 의한 것이므로 전자는 중성분자와의 탄성충돌에 의해 자신의 운동에너지를 잃어버리므로 전계로 인하여 전리에너지로 가속되어 전리나 여기 과정의 역할을 한다. 본 연구에서는 E/N=8 [Td]이하에서 전리가 발생하지 않았다.

### 2.3.5 평균에너지

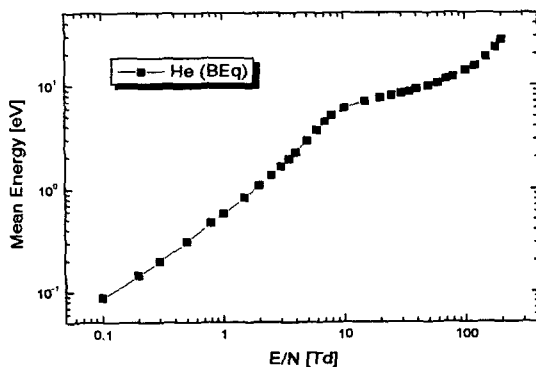


그림 8. He 가스 중에서의 전자의 평균에너지  
Fig 9. Mean energy of electrons in He gas

전자의 평균에너지는 전극간 거리와 시간의 합수로 계산한 전자의 에너지 분포함수, 전자이동속도 등에 관계되는 물리량으로 전극 면에서의 전자운동의 증가는 음극의 에너지가 양극으로 이동하고 양극에서는 반사나 음극에서 방출된 2차 전자가

가 모두 흡수된다.

## 3. 결 론

He 가스 전자 충돌 단면적을 이용하여 E/N=1~60 [Td]범위에서 전자수송특성을 볼츠만 방정식에 의해 시뮬레이션을 이용하여 해석한 결과는 다음과 같다.

1. He 가스의 이동속도는 낮은 압력과 높은 전계에서 증가하므로 전자의 이동속도가 전계에 비해하고 압력에 반비례함을 입증하는 것이다.
2. He 가스에서는 부착계수를 구할 수 없었는데, 이는 최외각 전자가 모두 안정된 준위에 있는 비활성 기체에 속하기 때문으로 생각된다.
3. He 가스의 종·횡방향 특성에너지는 E/N=10 [Td]에서 잠시 구배가 낮아지는데 이는 전자충돌에 의한 전리과정에 의해 전자가 중성분자와의 탄성충돌에 의해 자신의 운동에너지를 잃어버리기 때문이다.
4. MCS 프로그램과 볼츠만 법은 거의 실험치와 일치하는 우수한 프로그램으로써 실험에 드는 비용 및 시간을 크게 절약할 수 있는 시뮬레이션 방법이다.
5. He 가스의 전자수송특성 파악으로 전기적 절연내력과 소호특성의 질적 향상, 각종 고전압기기 및 반도체 제조용 기체 Plasma etching 공정, CVD (Chemical Vapor Deposition)에 의한 박막형성, 초 LSI용 절연막 등에 공업적으로 활용에 기여할 것으로 판단된다.

### [참 고 문 헌]

- [1] 電氣學會 技術報告, “기체방전 시뮬레이션 技法”, 第140号, 1974.
- [2] “몬테카를로法と 시뮬레이션”, 培風館, 1989.
- [3] L. G. H. Huxley, R. W. Crompton. “The diffusion and drift of electrons in gases”, John, Wiley and sons.
- [4] R. W. L. Thomas and W. R. L. Thomas, “Monte Carlo simulation of electrical discharges in gases”, J.Phys. B (Atom molec. phys.), Ser. 2, Vol. 2, 1969.
- [5] H. Itoh and T. Musha, “Monte Carlo Calculations of Motions in Helium”, J. Phys. Soc. Japan, Vol. 15, No. 9, pp1675-1680, 1960.
- [6] 菅野卓雄, “半導體 プラズ마 프로세스技術”, 産業圖書, pp. 38~50, 1993.
- [7] Stephen M. Rossnagel, J. Cuomo, William D. Westwood, “Handbook of Plasma Processing Technology”, Noyes Publications, 1990.
- [8] Brian Chapman, “Glow Discharge Processes”, John Wiley & Sons, 1980.
- [9] 森 正武. “Fortran 77 數値計算 プログラミング 岩波書店, pp 41~44, 1995.