

MCS-BE에 의한 SF₆+He 혼합기체의 전자수송특성 해석

Analysis of electron transport properties in SF₆+He mixtures gas used by MCS-BE

서상현* 하성철, 유희영, 김상남, 송병두

(Sang-Hyeon Seo, Sung-Chul Ha, Heoi-Young Yu, Sang-Nam Kim, Byung-Doo Song)

ABSTRACT

This paper describes the electron transport characteristics in SF₆+He gas calculated for range of E/N values from 50~700[Td] by the Monte Carlo simulation and Boltzmann equation method using a set of electron collision cross sections determined by the authors and the values of electron swarm parameters are obtained by TOF method. The results gained that the values of the electron swarm parameters such as the electron drift velocity, the electron ionization or attachment coefficients, longitudinal and transverse diffusion coefficients agree with the experimental and theoretical for a range of E/N.

Key words(중요용어) : MCS(몬테칼로 시뮬레이션), BE(볼츠만 방정식), Electron energy distribution function (전자에너지분포함수)

1. 서론

현재 25.9kV에서 아크 소호 매체로 쓰이고 있는 SF₆가스는 열적 화학적으로 안정된 불활성의 무독, 무색의 기체로써 이는 불소의 성질이 자유전자를 잘 끌어당기기 때문에 SF₆분자는 무거운 이온이 되어 잘 움직이지 않아 우수한 절연내력을 발휘하는 것이다. 하지만 SF₆가스의 가격은 상당히 고가이므로 이를 대체하기 위해 다른 기체와의 혼합에 의한 가격의 절감이 특히 요구되고 있는 실정이다.

이 때문에 이러한 혼합기체의 특성을 고가의 실험 장비없이 컴퓨터 시뮬레이션만을 이용하여 해석해 내는 것이 현재 일본과 국내에서도 진행이 되고 있는 실정에 있다.

그러나 국내에서는 대부분 단일 절연기체를 이용하여 임계절연 파괴강도에 관한 연구가 실험적, 이론적으로 되었을 뿐 SF₆+희가스 혼합기체 중에서의 전자수송특성에 관한 연구는 거의 미흡한 실정에 있으며 더욱이 기체 방전 현상으로 전리되는 플라즈마 프로세싱에 관한 연구는 더욱 미흡한 실정이다.

전계중에서 기체는 방전현상으로 전자군의 성질이 변화 하게 되며 이것을 해석하기 위해서는 전자기동 속도, 전리계수, 부착계수, 실효전리계수, 중핑방향의 확산계수, 평균에너지 및 전자에너지 분포함수를 파악하는 것이 절실히 요구되고 있다.

이와 같은 전자 수송특성을 해석하기 위해서는 정확한 운동량변환단면적이 필요하고 이를 값을 이용한 전자군 파라미터의 특성이 볼츠만 방정식과 몬테칼로 시뮬레이션에 의해 구해진다. 특히 몬테칼로법

은 가스의 탄성 및 비탄성충돌을 고려한 비평형 상태의 비교적 높은 E/N(Td) 영역의 범위에서 낮은 전리로 전자군파라미터와 전자 에너지분포함수를 해석하는 가장 우수한 방법이다.^(1,2)

본 연구에서는 SF₆기체의 전기 전도 특성을 나타내는 전리계수 (α/N), 부착계수 (η/N), 실효 전리계수 ($(\alpha - \eta)/N$), 전자기동속도(W), 전자의 확산계수(ND_L) 및 평균에너지 등의 전자수송 계수를 E/N(Td):50~700(Td) (E:전계, N:기체 분자수밀도, 1Td=1×10⁻¹⁷ V·cm², N:3.5353×10¹⁶cm⁻³ 0℃ 1Torr에 해당)의 범위에서 볼츠만 방정식에 의한 Backward prolongation법과 비등방성 산란을 고려한 몬테칼로 시뮬레이션을 TOF샘플링에 의해서 계산한다.

2. 시뮬레이션 이론

2-1. MCS법

MCS은 난수(Random Number)를 이용하여 충돌의 종류, 산란후의 방향 및 비행시간 등을 결정하면서 전자의 운동을 반복 추적한다. 또한 전자군의 성질을 조사하기 위한 몬테칼로법은 전자계내의 전자운동상태와 분자의 충돌산란확률을 고려하여 전자, 이온의 상태량을 추적하는 것을 기본으로 하여 입자를 확률현상의 난수로 모의하는 방법을 말한다. 사용하는 난수는 컴퓨터에서 발생하는 {0~1}사이의 擬似亂數(Pseudo random number)이다.^(3,4)

MCS은 확률론적인 기법을 이용하기 때문에 얻어진 결과로부터 통계적인 분산이 생기는 단점이 있다. 이 때문에 신뢰되는 파라미터를 구하기 위해서는 충분한 샘플수를 확보할 필요가 있다.

전자군에 대한 관측방법으로는 TOF, PT, SST 등이 있다. 몬테칼로 시뮬레이션에 있어서도 data 샘플링을 이들 관측법에 의해서 행한다. 3종의 관측법 중에 PT, SST에서는 계산을 행한 전자수가 그대로 샘플수로 생성되어 얻어지지만 TOF에서는 위치와 시간을 같이 지정하기 때문에 샘플수는 작게 된다. 더욱이 에너지 분포를 구하는 경우 샘플수는 점점 작게되고 통계적 변동을 많이 포함한 결과가 되기 쉽다. 그것을 방지하기 위해 전자수를 많게 계산하는데 그것에 비례하여 계산기 시간도 증가한다.

2-2. BE법

기체중의 방전현상을 원자론적인 입장에서 보면, 상호충돌을 되풀이 하는 하전입자 즉 전자, 원자, 분자, 이온에서 성립되며, 이들 하전입자는 전자군의 속도와 위치 및 시간에 따라 분류할수 있는데, 하전입자가 열평형상태에 있는 경우를 제외하고는 전자의 운동중 충돌에 의한 임의의 속도와 임의의 위치에 있는 전자의 수가 시간에 따라 변화한다.

하전입자 각각의 속도는 각각 다른 시간 t 와 더불어 변화하므로 일반적으로는 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 $\vec{v} - (\vec{v} + d\vec{v})$ 의 범위에 있는 미소 공간에 존재하는 입자수를 dn 이라 하면

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

로 나타낼 수 있다.

여기에서 $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ 는 하전입자의 속도분포함수이다.

볼츠만 방정식을 간단히 정리하면 다음과 같이 정리할수있다.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + \vec{a} \cdot \nabla_{\vec{v}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (2)$$

위 식에서 보면 전자군의 임의의 위치와 속도 및 시간을 갖는 전자수 밀도는 위치 변화에 따른 밀도와 전계의 속도 변화에 의한 밀도 그리고 충돌로 나타나는 속도 변화에 따른 밀도의 변화로 나타낼 수 있다는 것이다.

3. 전자 충돌 단면적

본 논문에서 사용한 SF₆와 He의 전자충돌단면적을 각각 그림3.1과 그림3.2에 나타내었는데 이들

충돌단면적은 전자의 특성을 파악하는 기초 자료로서 상당히 중요하다. 특히 여러 단면적 중에서 절연 가스에 관련된 전리와 부착단면적, 예칭에 관련된 여기, 해리 단면적은 충돌단면적에서도 상당히 중요하다. 그중에 SF₆의 전자충돌단면적은 다른 원자, 분자에 비하여 매우 큰 전자부착단면적 (Q_{a1}, Q_{a2}) 이 낮은 에너지영역에 존재하고 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), 진동여기 단면적(Q_v) 및 전 충돌단면적(Q_T) 등의 값은 그대로 이용하여 계산하였다.

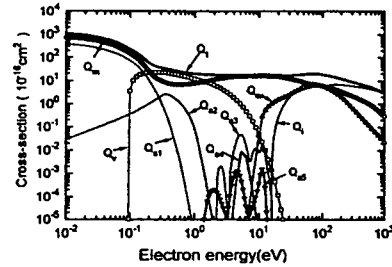


그림 3.1 SF₆기체의 전자충돌단면적
Fig. 3.1 The collision cross sections of electrons in SF₆ gas

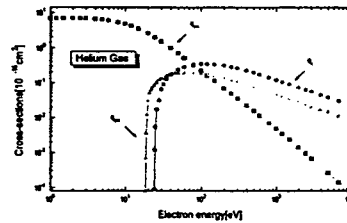


그림 3.2 He기체의 전자충돌단면적
Fig. 3.2 The collision cross sections of electrons in He gas

4. 결과 및 고찰

4.1 전자기동속도

그림 4.1에서 나타낸 결과에서 알 수 있듯이 순수 SF₆기체의 전자기동속도가 혼합기체보다 늦게 나타난 것을 확인 할 수가 있었다. 또한 He이 소량이라도 혼합되면 이동속도의 차가 많이 나오는 것을 알 수 있다.

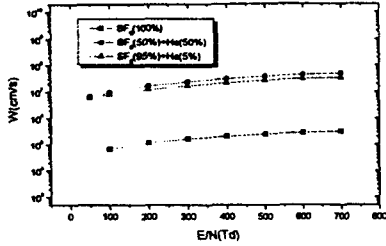


그림 4.1 SF₆+He가스의 전하이동속도
Fig.4.1 The drift velocity of electrons in SF₆+He gas

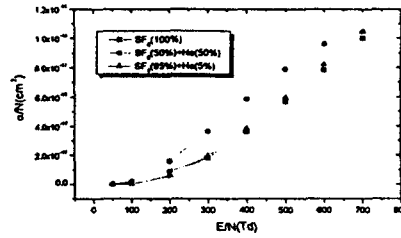


그림 4.3 SF₆+He가스의 전리계수
Fig. 4.3 The ionization of coefficients in SF₆+He gas

4.2 확산계수

그림 4.2에 나타난 확산계수는 기체분자수밀도와와의 적 ND_L 을 $E/N(Td)$ 의 함수로 나타내었다. ND_L 은 $E/N(Td)$ 의 증가에 따른 의존성이 크게 작용하지 않음을 알 수 있다. SF₆가스중의 전자확산계수는 전리, 부착계수 및 이동속도의 영향으로 하전입자밀도의 공간적구배와 전계가 공존하는 공간내에서 하전입자의 거시적운동이 일어나지 않고 평형상태의 균일한 밀도분포를 나타낸 것으로 생각된다.

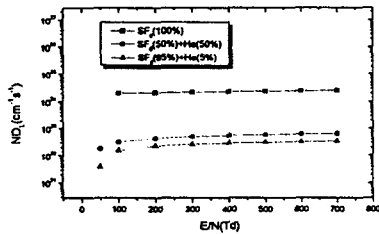


그림 4.2 SF₆+He의 확산계수
Fig.4.2 The diffusion coefficients in SF₆+He gas

4.4 부착계수

전자의 부착은 전자가 중성원자 혹은 분자에 충돌하면 에너지에 의하여 전자는 원자나 분자에 포획되어 부이온을 형성한다. 부이온은 전자에 비하여 질량이 크고 기체중에서 전계의 가속을 받아도 높은 에너지 상태에 도달하기 어렵고 전리능력도 없다. 따라서 원자 또는 분자에 전자가 부착하여 부이온이 안정하게 존재하기 위해서는 원자, 분자가 갖는 에너지는 전자가 부착하여 감소되어야 한다.

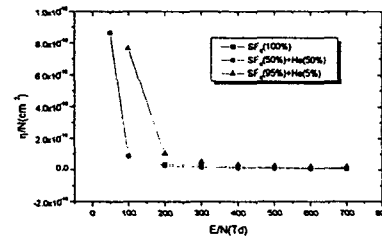


그림 4.4 SF₆+He가스의 전자 부착계수
Fig. 4.4 The attachment coefficients in SF₆+He gas

4.3 전리계수

E/N 값이 적을 때는 α/N 은 서서히 증가하고 E/N 값이 클 때는 α/N 이 급속히 증가한다. 이것은 그림 4.3의 SF₆충돌단면적 중에서 부착단면적 Q_{a1} , Q_{a2} 의 절대값이 크므로 E/N 이 낮은 영역에서는 전자의 운동에너지가 전리에너지 보다 크게되어 전리가 증가하기 때문이다. 기체 방전현상중에서 가장 중요한 전리과정은 전자충돌에 의한 것이므로 전자는 중성분자와의 탄성충돌에 의해 자신의 운동에너지를 잃어버리므로 전계로 인하여 전리에너지로 가속되어 전리나 여기과정의 역할을 한다.

4.5 실효전리계수

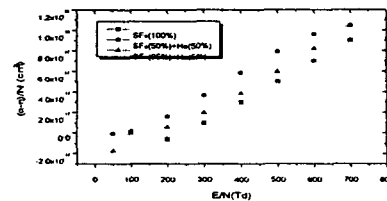


그림 4.5 SF₆+He의 실효전리계수
Fig. 4.5 The effective coefficients in

SF₆+He gas

그림4.5의 실효전리계수에서 전자가 전계로부터 큰 에너지를 얻게되면 부착이 일어나기 어렵다. 따라서 E/N이 $(\alpha-\eta)/N$ 을 +값이 되게끔 충분히 크게 하지 않으면 전자의 충돌전리는 효과적으로 이루어지지 않는다고 생각된다. 그림에서 알 수 있듯이 순수SF₆기체가 같은 E/N에서 더 큰 부착특성을 나타내는 것이 해석되었다.

4.6 평균에너지

그리고 전자의 평균에너지 ($\bar{\epsilon}$)는 전극간거리의 E/N (Td)의 변화에 따른 몬테칼로 시뮬레이션으로 그림4.6에 그 값을 나타내었다. 전자가 존재하는 경우에 샘플링의 차이에 따라서 음극과 양극 가까운 영역의 전자의 평균에너지는 영점으로부터 비탄성충돌이 일어날 에너지까지는 직선적으로 상승하여 비평형의 상태로 나타났으며 그 외 영역에서는 거의 평형상태의 에너지 값의 결과를 나타내었다.

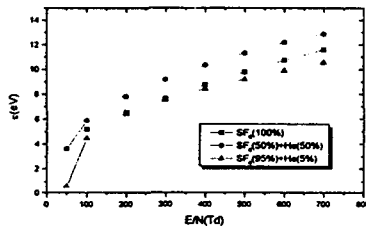


그림 4.6 SF₆+He가스의 평균에너지
Fig. 4.6 The mean energy in SF₆+He gas

5. 결론

SF₆+He가스의 전자충돌단면적을 이용하여 $50 \leq (E/N) \leq 700$ 범위에서 전자군의 파라미터 특성을 전자산란의 비평형상태에서 몬테칼로 시뮬레이션의 TOF샘플링으로 계산하였고 볼츠만법에 의해 전리, 전자기동속도를 구하였다. 또한 전자군 수송계수의 해석결과로부터 다음과 같은 결론을 얻었다.

1. SF₆기체의 대표적인 특징인 부착특성이 E/N이 200(Td)이상에서는 He과의 혼합에 의해서도 큰 변화가 없는 것을 확인하였다.
2. 실효전리계수가 -값이 되는 부분은 부착계수가 전리계수보다 큰 것으로 순수SF₆기체가 같은 E/N에서 더 큰 부착특성을 나타내는 것이 해석되었다.
3. MCS프로그램과 볼츠만 법은 그 결과값이 거의 실험치와 일치하는 우수한 프로그램으로써 실험에

드는 비용 및 시간을 크게 절약할 수 있다.

앞으로 현재 사용되고 있는 25.9kV G.C.B에 들어가는 순수 SF₆가스를 대체하는 새로운 절연기체 개발에 MCS프로그램과 볼츠만 법을 이용한다면 많은 성과가 있을 것으로 기대되고 또한 SF₆+He 혼합기체의 전자수송특성 파악으로 반도체의 박막 공정, 에칭 및 Plasma CVD의 활용에 기여할 것으로 판단된다.

참고문헌

1. H. Itoh, Y. Miura, N. Ikuta, Y. Nakao and H. Tagashira, "Electron swarm development in SF₆ : I. Boltzmann equation analysis", J. Phys. D: Appl. Phys. 21, pp.922-930, 1988.
2. H. Itoh and T. Musha "Monte Carlo Calculations of Motions in Helium", J. Phys. soc. japan, Vol.15, No.9, pp.1675-1680, 1960.
3. 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.
4. Philip. E. Luft, "Description of a Backward prolongation program for computing transport coefficients", JILA, information center report, No.19, 1975.
5. M. Hayashi, and S. Hara, "Joint Symposium on Electron and Ion Swarm and Low Energy Electron Scattering", A Satellite of ICPEAC XVII, Proc pp.109-111, 1991.
6. Y. Nakamura and M. Kurachi, "Electron Transport Parameters in Argon and its momentum transfer cross section" J. Phys. 21, pp.718-723, 1988.
7. 氣體放電 シミュレーション技法(제140호), 1974.
8. K.L. Bell, N.S. Scott and M.A. Lennon, "The Scattering of low-energy electrons by Argon atoms" J. Phys. B: At. Mol. Phys. 17, pp.4757-4765, 1984.