

# MCS-BE에 의한 SF<sub>6</sub>+N<sub>2</sub> 혼합기체의 전자수송특성 해석

## Analysis of electron transport properties in SF<sub>6</sub>+N<sub>2</sub> mixtures gas used by MCS-BE

서상현\* 하성철

(Sang-Hyeon Seo, Sung-Chul Ha)

### ABSTRACT

The electron transport coefficients in SF<sub>6</sub>+N<sub>2</sub> gas is analysed in range of E/N values from 100~900(Td) by a Monte Carlo simulation and Boltzmann method, 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.

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

#### 1. 서론

전계가 인가된 전리기체 중에서 전자의 이동, 확산, 충돌, 부착현상에 대해 전자군의 수송특성을 정량적으로 해석하기 위해서는 전자 에너지 분포함수와 각 입자 상호간의 충돌단면적 및 전자 수송계수를 구하여 전리기체의 물성적인 특성을 구할 수 있게 된다. 따라서 측정된 전리아동속도와 계산에 의해 산출된 전자 수송계수를 비교하여 전리기체에 대한 전자군의 물리적 현상을 명확히 규명하여야 한다. 그러므로 전계가 인가된 기체 중에서의 전자의 운동을 파악하기 위해서는 운동량 변환 단면적, 여기 충돌 단면적, 전리 충돌 단면적, 전리아동속도, 확산계수, 전자 부착계수, 전자에너지분포함수에 대한 정확한 측정과 해석이 필요하다. 특히 전계를 인가한 기체중에서의 전자 이동속도는 전자의 충돌단면적을 결정하는 중요한 요소가 되고, 전자의 충돌단면적을 이용하여 입자군의 전자에너지 분포함수와 수송계수를 계산할 수 있다. 또한 측정된 전리아동속도와 볼츠만수송방정식을 Backward prolongation법으로 해석하여 N<sub>2</sub>, SF<sub>6</sub>기체의 수송계수 및 충돌단면적을 결정하고 전자수송계수와 전자에너지분포함수, 전자 부착계수 등의 영향을 검토하여, SF<sub>6</sub>기체와 N<sub>2</sub>순수기체를 혼합함으로써 전기적 절연특성과 냉각효과의 개선을 위한 혼합기체의 개발에 관련된 기초적 물성의 해석과 응용성을 검토하고자 한다.

본 연구에서는 SF<sub>6</sub>+N<sub>2</sub>기체의 전기 전도 특성을 나타내는 전리계수 ( $\alpha/N$ ), 부착계수 ( $\eta/N$ ), 실효 전리계수 ( $(\alpha - \eta)/N$ ), 전리아동속도(W), 전자의 확산계수 ( $NDv$ ) 및 평균에너지 등의 전자수송계수를 E/N(Td):100~900(Td) (E:전계, N:기체분자수밀도, 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 볼츠만 방정식에 의한 Backward prolongation법과 비등방성 산란을 고려한 몬테칼로 시뮬레이션을 TOF샘플링에 의해서 계산한다.

#### 2. 시뮬레이션

##### 2-1. MCS법과 BE법

MCS은 난수(Random Number)를 이용하여 각종 파라미터의 위치적 변동에 의해서 전자의 평균에너지와 전자위치 및 시간의 함수로서 추적하여 해석하는 방법으로서 이들 전자의 물리량을 가상적으로 샘플링하고 그들 하전입자의 운동을 컴퓨터로 분석하여 전자군의 파라미터의 값을 확률적으로 결정하는 것이다. 이때 충돌의 종류, 산란후의 방향 및 비행시간 등을 결정하면서 전자의 운동을 반복 추적하는 시뮬레이션으로 전자군의 성질을 조사하기 위해 전자계내의 전자운동상태와 분자의 충돌산란확률을 고려하여 전자, 이온의 상태를 추적하는 것을 기본으로 하여 입자를 확률현상의 난수로 모의하는 방법을 말한다. 또한 확률론적인 기법으로 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 많이 설정하여 계산하는데 그것에 비례하여 계산기 시간도 증가한다.

### 2-2. 전자 산란이론

일반적으로 충돌후의 전자의 산란방향은 등방산란과 비등방산란으로 분류한다.<sup>(1)</sup>

#### 2.2.1 등방산란

전자의 새로운 산란각  $\theta$  및  $\psi$ 는 입사각에 관계없이 2개의 난수계열에 의하여 다음과 같이 결정한다.

$$\cos \theta = 1 - 2\xi_1 \quad \dots \dots \dots (1)$$

$$\psi = 2\pi \xi_2 \quad \dots \dots \dots (2)$$

( $\theta$ : z축과 이루는 전자의 산란각  $\psi$ : x축과 이루는 전자의 산란각)

#### 2.2.2 비등방산란

비등방산란을 가정한 경우 충돌후의 편향각( $\omega$ )와 방위각( $\chi$ )는 다음과 같이 2개의 난수에 의하여 결정한다.

에너지  $\epsilon$ 를 갖는 전자가  $k$  충돌때의 미분단면적을  $\sigma_k(\epsilon, \omega)$ 로 하면 그때의 적분단면적을  $q_k(\epsilon, \omega)$ 는 다음과 같이 나타낸다.<sup>(2)</sup>

$$q_k(\epsilon) = \int_0^\pi \sigma_k(\epsilon, \omega') 2\pi \sin \omega' d\omega' \quad \dots \dots (3)$$

여기서 편향각  $\omega$ 와 방위각  $\chi$ 는 식(4)와 식(5)으로 구한다. ( $\xi_1, \xi_2$ : 난수)

$$\xi_1 = \int_0^\omega \sigma_k(\epsilon, \omega') 2\pi \sin \omega' d\omega' / q_k \quad \dots \dots (4)$$

$$\xi_2 = \chi / 2\pi \quad \dots \dots \dots (5)$$

전자의 입사방향 ( $\theta', \psi'$ ) 및 그에 대한 산란방향 ( $\omega, \chi$ )과 전자의 새로운 운동방향( $\theta, \psi$ )은 다음과 같이 나타낸다.

$$\cos \theta = \cos \theta' \cos \omega + \sin \theta' \sin \omega \cos \chi \quad \dots \dots (6)$$

$$\cos \psi = \frac{1}{\sin \theta} \{ \cos \psi' (\cos \omega \sin \theta' - \sin \omega \cos \theta' \cos \chi) - \sin \omega \cos \theta' \cos \chi \} \quad \dots \dots (7)$$

$$\sin \psi = \frac{1}{\sin \theta} \{ \sin \psi' (\cos \omega \sin \theta' - \sin \omega \cos \theta' \cos \chi) - \cos \psi \sin \omega \sin \chi \} \quad \dots \dots (8)$$

또한 미분단면적  $\sigma_k(\epsilon, \omega)$ 은 충돌전의 전자에너

지 ( $\epsilon$ )에 의하여 결정되지만 그의 에너지 ( $\epsilon$ )가 미분단면적의 입력에너지값인  $\epsilon(\epsilon_j, \omega)$ 와

$\epsilon(\epsilon_{j+1}, \omega)$ 으로 사용할때 미분단면적  $\sigma_k(\epsilon, \omega)$ 은

$$\sigma_k(\epsilon, \omega) = \epsilon(\epsilon_j, \omega) + \{ \epsilon(\epsilon_{j+1}, \omega) - \epsilon(\epsilon_j, \omega) \} \times \frac{\epsilon - \epsilon_j}{\epsilon_{j+1} - \epsilon_j} \quad \dots \dots \dots (9)$$

식 (9)로 나타낸다.

### 3. 전자 충돌 단면적

전자충돌단면적은 전자의 거시적 특성을 이해하는데 기초적 자료로서 중요한 자료로서 가스 절연에서 비평형 플라즈마 응용기술에 이르기까지 각각의 경우에 필요한 가스의 종류, 상태조건 등을 파악할 수 있으며 필요한 전자특성에 대한 정보를 알 수 있다. 특히 여러 단면적 중에서 절연가스에 관련된 전리와 부착단면적, 에칭에 관련된 여기, 해리 단면적은 충돌단면적에서도 상당히 중요하다.

본 연구에 이용한 SF<sub>6</sub>의 전자충돌단면적은 H. Itoh, et al의 값을 그림1에 나타내었다. 이 SF<sub>6</sub>의 전자충돌단면적은 다른 원자, 분자에 비하여 매우 큰 전자부착단면적 (Q<sub>a1</sub>, Q<sub>a2</sub>)이 낮은 에너지영역에 존재하고 또한 해리성 부착단면적(Q<sub>a3</sub>, Q<sub>a4</sub>, Q<sub>a5</sub>)의 Threshold에너지의 값은 각각 3.29(eV), 3.95(eV), 1.57(eV)를 이용하였다.

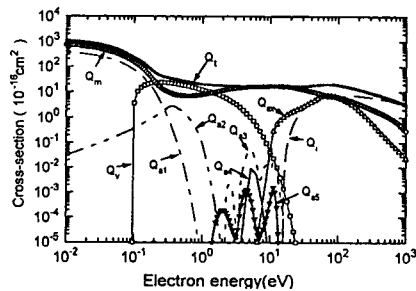


그림 1 SF<sub>6</sub>기체의 전자충돌단면적  
Fig. 1 The collision cross sections of electrons in SF<sub>6</sub> gas

그리고 탄성충돌에 의한 운동량변환단면적(Q<sub>m</sub>), 여기단면적(Q<sub>ex</sub>), 전리단면적(Q<sub>i</sub>), 진동여기단면적(Q<sub>v</sub>) 및 전 충돌단면적(Q<sub>T</sub>) 등의 값은 그대로 이용하여 계산하였다.

### 4. 결과 및 고찰

#### 4.1 전자기동속도

전계로부터 에너지를 얻은 전자가 미소거리를 이

동하는 동안에 충돌전리확률은 평균자유행정에 의해 나타내며 이것은 압력에 반비례하므로 낮은 기압에서 전자에너지는 크므로 전자기동속도는 증가하는 것으로 생각된다. 그림에서는 부착특성이 강한 SF<sub>6</sub>가스의 혼합비가 높아질수록 전자 이동속도가 떨어지는 것을 확인할 수 있다.

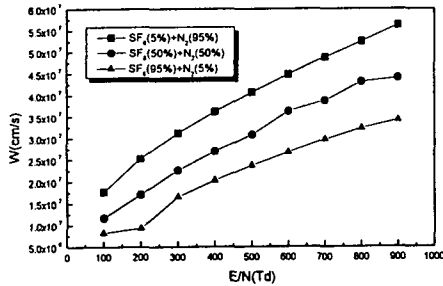


그림 2 SF<sub>6</sub>+N<sub>2</sub>가스의 전자기동속도  
Fig. 2 The drift velocity of electrons in SF<sub>6</sub>+N<sub>2</sub> gas

#### 4.2 확산계수

그림3의 확산계수는 기체분자수밀도와와의 적 Dv을 E/N(Td)의 함수로 나타내었다. Dv는 E/N(Td)의 증가에 따른 의존성이 크게 작용하지 않음을 알 수

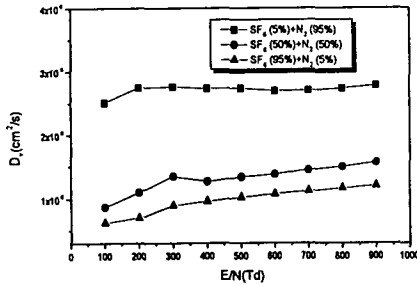


그림 3 SF<sub>6</sub>+N<sub>2</sub>의 확산계수  
Fig. 3 The diffusion coefficients in SF<sub>6</sub>+N<sub>2</sub> gas

있다. SF<sub>6</sub>가스중의 전자확산계수는 전리 부착 및 이동속도의 영향으로 하전입자밀도의 공간적구배와 전계가 공존하는 공간내에서 하전입자의 거시적운동이 일어나지 않고 평형상태의 균일한 밀도분포를 나타낸 것으로 생각된다.

#### 4.3 전리계수

낮은 E/N값에서  $\alpha/N$ 은 급격히 증가하고 E/N값

이 약 300(Td)인 경우에는 서서히 증가한다. 이것은 그림1의 SF<sub>6</sub>충돌단면적 중에서 부착단면적 Q<sub>a1</sub>, Q<sub>a2</sub>의 절대값이 크므로 E/N이 높은 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.

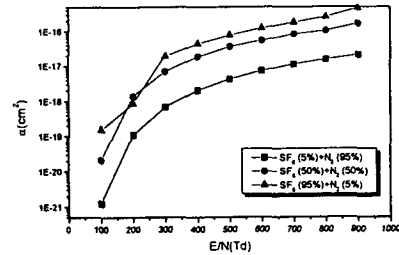


그림 4 SF<sub>6</sub>+N<sub>2</sub>가스의 전리계수  
Fig. 4 The ionization coefficients in SF<sub>6</sub>+N<sub>2</sub> gas

#### 4.4 부착계수

전자의 부착은 전자가 중성원자 혹은 분자에 충돌

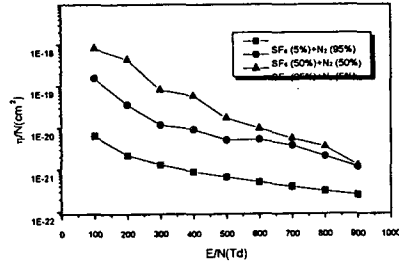


그림 5 SF<sub>6</sub>+N<sub>2</sub>가스의 전자 부착계수  
Fig. 5 The attachment coefficients in SF<sub>6</sub>+N<sub>2</sub> gas

하면 에너지에 의하여 전자는 원자나 분자에 포획되어 부이온을 형성한다. 그림에서 알수 있듯이 SF<sub>6</sub>의 혼합비가 높을수록 뛰어난 전자 부착 특성을 나타냄을 확인할 수 있었다.

#### 4.5 실효전리계수

그림6의 실효전리계수에서 전자가 전계로 부터 큰 에너지를 얻게되면 부착이 일어나기 어렵다. 따라서 E/N이  $(\alpha - \eta)/N$ 을 +값이 되게끔 충분히 크게 하

지 않으면 전자의 충돌전리는 효과적으로 이루어지지 않는다고 생각된다.

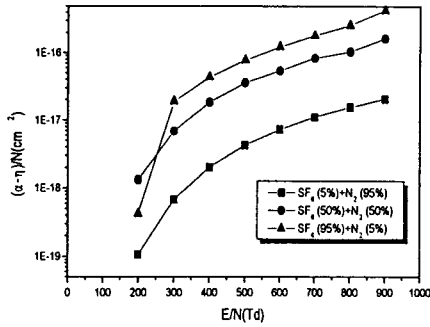


그림 6 SF<sub>6</sub>+N<sub>2</sub>의 실효전리계수  
Fig. 6 The effective coefficients in SF<sub>6</sub>+N<sub>2</sub> gas

#### 4.6 평균에너지

전자의 평균에너지는 E/N(Td) 및 초기전자수를 파라미터로 하여 BE법으로 전자를 추적하였다. 전자의 평균에너지는 전극간 거리 및 시간의 함수로써 계산되는 전자에너지 분포, 전자 이동속도 등에 관계되는 물리량이다. 따라서 음극면에서의 전자의

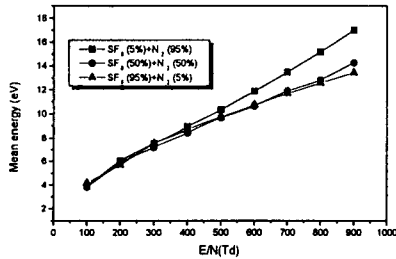


그림 7 SF<sub>6</sub>+N<sub>2</sub>가스의 평균에너지  
Fig. 7 The mean energy in SF<sub>6</sub>+N<sub>2</sub> gas

평균에너지는 비탄성 충돌이 일어날 때까지는 거의 일정한 에너지 상태를 나타내고 있다.

#### 5. 결론

SF<sub>6</sub>+N<sub>2</sub>가스의 전자충돌단면적을 이용하여 100 ≤ (E/N) ≤ 900범위에서 전자군의 파라미터 특성을 전자산란의 비평형상태에서 몬테칼로 시뮬레이션의 TOF샘플링으로 계산하였고 볼츠만법에 의해 전리, 전하이동속도를 구하였다. 따라서 전자군 수송계수

의 해석결과로부터 다음과 같은 결론을 얻었다.

1. SF<sub>6</sub>+N<sub>2</sub> 혼합기체중의 SF<sub>6</sub>기체의 혼합비가 증가하면 전하이동속도가 감소되었고 따라서 혼합기체의 절연특성이 SF<sub>6</sub>기체의 혼합비의 증가에 따라 개선됨을 알수 있었다.

2. SF<sub>6</sub>와 N<sub>2</sub>의 혼합은 극저온 지방의 차단기에 주로 사용이 되고 있는데 혼합된 SF<sub>6</sub>가스의 양이 많아 질수록 뛰어난 차단 효과가 나타남을 확인할 수 있었다.

혼합기체를 전기기기의 절연기체 혹은 냉각기체로서 실용화하기 위해서는 높은 압력에서의 전하이동속도의 측정과 다양한 혼합비에 대한 물성적, 화학적인 실험과 해석이 선행되어야 하며, 앞으로 수행해야 할 과제라고 생각된다.

#### 참고문헌

1. H. Itoh, Y. Miura, N. Ikuta, Y. Nakao and H. Tagashira, "Electron swarm development in SF<sub>6</sub> : 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. Y. Nakamura and M. Kurachi, "Electron Transport Parameters in Argon and its momentum transfer cross section" J. Phys. 21, pp.718-723, 1988.
6. 氣體放電 シミュレーション技法(제140호), 1974.