

논문 13-4-14

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

Analysis of electron transport properties in SF<sub>6</sub>+He mixture gas used by MCS-BE

하설철\*, 유희영\*\*, 김상남\*\*\*, 송병두\*, 백승권\*\*\*\*

(Sung-Chul Ha\*, Heoi-Young Yu\*\*, Sang-Nam Kim\*\*\*, Byoung-Doo Song\*, Seung-Kwun Baek\*\*\*\*)

### Abstract

This paper describes the electron transport characteristics in SF<sub>6</sub>+He gas calculated E/N values 0.1~700[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 obtained by TOF method. This study gained the values of the electron swarm parameters such as the electron drift velocity, the electron ionization or attachment coefficients, longitudinal and transverse diffusion coefficients for SF<sub>6</sub>+He gas at a range of E/N.

**Key Words(중요용어)** : MCS (몬테칼로 시뮬레이션), BEq (볼츠만 방정식), Electron energy distribution function (전자에너지 분포함수), SST (Steady State Townsend)

### 1. 서 론

SF<sub>6</sub>가스는 고압차단기에서 아크소호매체로 사용되는 열적 화학적으로 안정된 불활성의 무독, 무색의 기체로써 우수한 절연내력을 가지고 있다. 그러나 SF<sub>6</sub>가스의 가격은 상당히 고가이므로 이를 대체하기 위해 다른 기체와의 혼합에 의한 가격의 절감이 특히 요구되고 있는 실정이다. 이 때문에 이러한 혼합기체의 특성을 고가의 실험장비 없이 컴퓨터 시뮬레이션만을 이용하여 해석하는 것이 현재 일본과 국내에서도 진행되고 있다. 그러나 국내에서는 대부분 단일 절연기체를 이용하여 임계 절연 강도에 관한 연구가 실험적, 이론적으로

되었을 뿐 SF<sub>6</sub>+희가스 혼합기체 중에서의 전자수송특성에 관한 연구는 거의 미흡한 실정에 있으며 더욱이 기체 방전 현상으로 전리되는 플라즈마 프로세싱에 관한 연구는 더욱 미흡한 실정이다. 특히 전계 중에서 기체는 방전현상으로 전자군의 성질이 변화하게 되며 이것을 해석하기 위해서는 전자이동속도, 전리계수, 부착계수, 실효전리계수, 종횡방향의 확산계수, 평균에너지 및 전자에너지 분포함수를 파악하는 것이 절실히 요구되고 있다. 이와 같은 전자 수송특성을 해석하기 위해서는 정확한 운동량변환단면적이 필요하고 이를 얻을 이용한 전자군 파라미터의 특성이 볼츠만 방정식과 몬테칼로 시뮬레이션에 의해 구해진다. 즉 전자사태에서 나타나는 전체의 전자를 추적하여 전자이동속도 등 전자군 파라미터의 동향을 조사하여 이들 전자의 물리량을 가상적으로 샘플링(Sampling)하고 그들 하전입자의 운동을 전자계산기로 추적하여 전자군 파라미터의 특성을 확률적으로 결정하는 것이다.[1]

본 연구에서는 SF<sub>6</sub>기체의 전기 전도 특성을 나타내는 전리계수 ( $\alpha/N$ ), 부착계수 ( $\eta/N$ ), 실효전리계수 ( $(\alpha - \eta)/N$ ), 전자이동속도(W), 전자

\* 동국대학교 전기공학과

(서울시 종로구 필동3가 26번지 100-715

Fax : 02-2260-3348

E-mail : scha@cakra.dongguk.ac.kr

\*\* 대림대학 정보통신과

\*\*\* 인천전문대 전기과

\*\*\*\* 인제대학교 전자공학과

1999년 10월 30일 접수, 2000년 2월 24일 심사완료

의 종횡방향의 확산계수 ( $ND_L$ ,  $ND_T$ ) 및 평균에너지 등의 전자수송계수를 E/N(Td):0.1~700(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]

## 2. 시뮬레이션 이론

### 2.1 몬테칼로 시뮬레이션법

몬테칼로법은 방전공간내 입자의 분포를 난수(Random Number)를 이용하여 추정한 확률적 수학의 한 분야로 불규칙적인 운동을 모델화한 기법으로 매우 다양한 문제를 전자계산기에 발생시켜 Random한 실험결과를 해석하는데 유용한 수학적 모의 방법이다. 이 몬테칼로 시뮬레이션(MCS)은 Itoh, Musha(1960) 및 R.W.L. Thomas, W.R.L. Thomas(1969)에 의해서 최초의 연구가 시작되었다.[2]

방전공간 내에서 난수를 이용하여 각종 파라미터의 위치적 변동에 의해서 전자의 평균에너지와 전자위치 및 시간의 함수로서 해석하는 몬테칼로법은 전자사태에서 나타나는 개개의 전자를 추적하여 방전 파라미터의 동향을 조사하고, 이를 전자의 물리량을 가상적으로 샘플링하여 그들 하전입자의 운동을 컴퓨터로 분석하고 전자군의 파라미터의 값을 확률적으로 결정하는 것이다.

MCS에서는 난수를 이용한 충돌현상을 확률적으로 취급하며 여기서 사용하는 난수는 컴퓨터에서 발생하는 [0, 1]사이의 의사난수(Pseudo Random Number)이다.[3][4] 난수의 값(Random Value)은 그 발생 프로그램에 따라 다르고, 반드시 이상적인 것은 아니다.

### 2.2 볼츠만 방정식법

기체중의 방전현상을 원자론적인 입장에서 보면, 상호충돌을 되풀이하는 하전입자 즉 전자, 원자, 분자, 이온에서 성립되며, 이를 하전입자는 전자군의 속도와 위치 및 시간에 따라 분류할 수 있는데, 하전입자가 열평형 상태에 있는 경우를 제외하고 전자의 운동 중 충돌에 의한 임의의 속도와 임의의 위치에 있는 전자의 수가 시간에 따라 어떻게 변화하는가를 결정하는 것이다.

전자군의 임의의 위치와 속도 및 시간의 함수인

전자수 밀도는 위치 변화에 따른 밀도의 변화와 전계에 의한 속도변화에 따른 밀도의 변화, 그리고 충돌로 나타나는 속도의 변화에 의한 밀도의 변화로 나타낼 수 있고 이것을 식으로 표현한 것이 볼츠만 방정식(Boltzmann Equation)이다.[1]

BEq에서는 MCS(Monte Carlo Simulation)와 달리 개개의 전자를 추적하지 않고 처음부터 다수의 입자를 포함하는 전자류를 취급하기 위하여 충돌의 확률적 성질을 기초로 하여 전자군의 연속적인 통찰이 가능하고 따라서 전자군의 운동과정을 명확히 규명할 수 있으며 이들의 여러 가지 파라미터를 정량적으로 해석하는 경우 비교적 짧은 시간으로 전산 처리하여 구하여진다.[5]

## 3. 전자의 충돌단면적

충돌단면적은 전자의 거시적 특성을 이용하는데 기초적 자료로서 중요하다. 가스절연에서 비평형 플라즈마 응용기술에 이르기까지 각각의 경우에 필요한 가스의 종류, 상태조건(E/N, 가스밀도, 여기조건)을 파악할 수 있으며 전자수송특성에 관한 정보를 알 수 있다.[6][7] 절연가스로는 여러 단면적 중에서 전리단면적( $q_i$ )과 부착 단면적( $q_a$ )이 중요하며 에칭가스로는 여기단면적( $q_{ex}$ )과 해리단면적이 중요하다.[8][9] 또한 기체분자에 대한 전자의 충돌단면적은 전자의 에너지에 의해서 변화 한다. 따라서 충돌입자간의 상호작용으로 기체분자의 여기, 해리, 이온화 등의 반응으로 여기단면적, 해리단면적, 이온화단면적 등으로 나타내며 전충돌단면적은 개개의 반응과정의 합으로 나타낸다.

### 3.1 SF<sub>6</sub> 충돌단면적

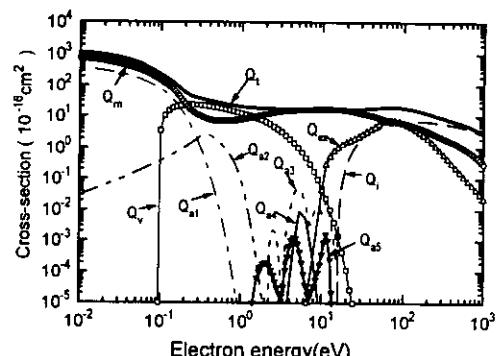


그림 3. SF<sub>6</sub> 기체의 전자 충돌 단면적

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

그림 1의 SF<sub>6</sub> 전자충돌단면적은 다른 원자, 분자에 비하여 매우 큰 전자부착 단면적( $Q_{al}$ ,  $Q_{a2}$ )이 낮은 에너지 영역에 존재하고 또한 해리성 부착단면적( $Q_{a3}$ ,  $Q_{a4}$ ,  $Q_{a5}$ )의 Threshold 에너지의 값은 각각 3.29(eV), 3.95(eV), 1.57(eV)를 이용하였다.

### 3.2 He 충돌단면적

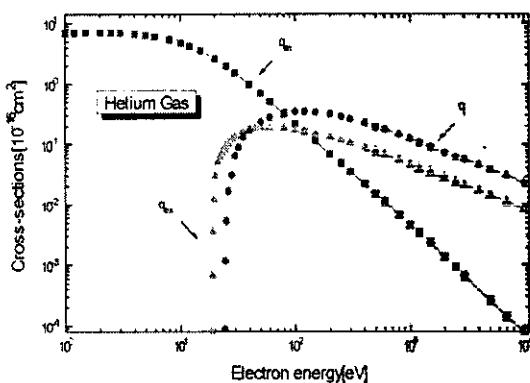


그림 2. He 가스의 전자 충돌 단면적

Fig. 2. The collision cross section of electrons in He gas

본 연구에 이용한 He의 전자충돌단면적 그림 2은 운동량 변환단면적( $q_{lm}$ ), 전자 여기단면적( $q_{ex}$ ), 전리단면적( $q_i$ )으로 구성되어 있다.

## 4. 해석결과 및 고찰

### 4.1 전자이동속도

#### 4.1.1 SF<sub>6</sub>

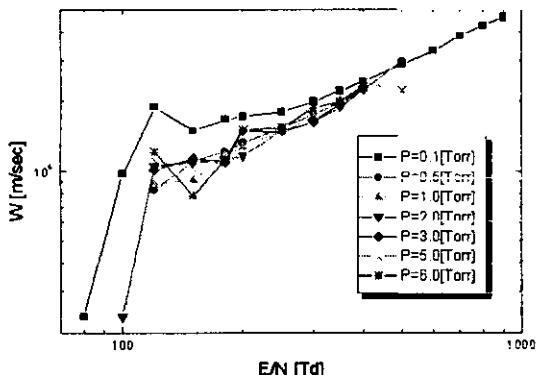


그림 3. 몬테칼로 시뮬레이션에 의한

SF<sub>6</sub> 가스의 전자이동속도

Fig. 3. The drift velocity in SF<sub>6</sub> gas by MCS

그림 3의 전자이동속도(W)는 압력 P = 0.1, 0.5, 1.0, 3.0, 5.0, 6.0[Torr] 여섯 가지에 대하여 몬테칼로 시뮬레이션법으로 계산한 것이다. 전자이동속도는 E/N[Td]에 따라 거의 선형적으로 증가한다. P = 0.1 [Torr]에서 가장 이동속도가 크게 나타났으며, P = 0.1~3.0[Torr]까지는 압력의 증가에 따른 이동속도의 감소를 확인할 수 있었다.

하지만 E/N=400[Td] 이상에서는 전자이동속도 값이 압력에 관계없이 차이가 나타나지 않았다.

#### 4.1.2. He

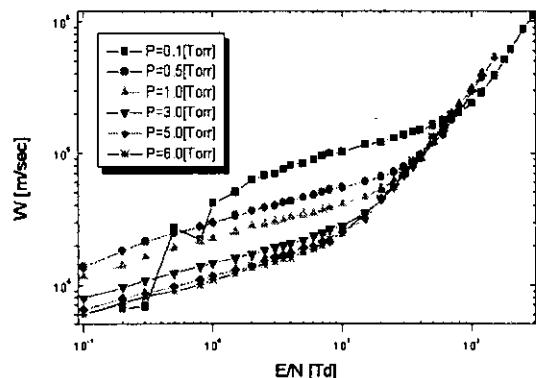


그림 4. 몬테칼로 시뮬레이션에 의한

He 가스의 전자이동속도

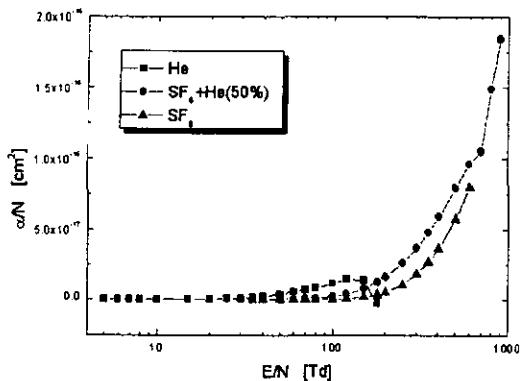
Fig. 4. The Drift velocity in He gas by MCS

그림 4의 전자이동속도(W)는 E/N=0.1~300[Td] 범위에서 압력 P = 0.1, 0.5, 1.0, 3.0, 5.0, 6.0[Torr] 여섯 가지에 대하여 몬테칼로 시뮬레이션법으로 계산한 것이다.

전자에너지 분포함수와 탄성, 비탄성 충돌단면적을 이용하여 계산된 전자이동속도는 E/N[Td]에 따라 거의 선형적으로 증가하다 높은 E/N값에서 서로 일치하는 것을 보여준다. 또한 전계로부터 에너지를 얻은 전자가 미소거리를 이동하는 동안에 충돌 전리화률은 평균 자유행정에 의해 나타내며, 이것은 압력에 반비례하고, 낮은 기압에서 전자에너지가 크므로 전자이동속도는 증가하는 것으로 생각된다.

### 4.2 전리계수

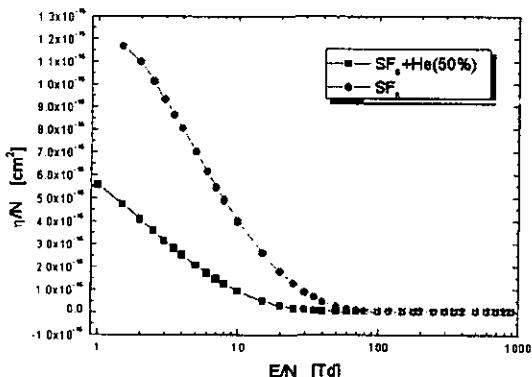
그림 5에 나타난 바와 같이 E/N값이 적을 때는  $\alpha/N$ 이 서서히 증가하고 E/N값이 클 때에는  $\alpha/N$ 이 급격히 증가한다. 다만 He 가스의 경우에는 증

그림 5. SF<sub>6</sub>+He 가스의 전리계수Fig. 5. The ionization coefficients in SF<sub>6</sub>+He gas

가율이 중간에 감소하여 더 이상의 전리과정을 해석할 수 없었는데, 이와 같은 현상은 전자의 에너지가 증가하면 충돌할 때에 상호작용시간이 너무 짧아서 전리하기가 어렵기 때문으로 생각된다.

기체방전현상 중에서 가장 중요한 전리과정은 전자충돌에 의한 것이므로 전자는 중성분자와의 탄성충돌에 의해 자신의 운동에너지를 잃어버리므로 전계로 인한 에너지의 가속으로 전리나 여기과정의 역할을 한다. 본 연구에서는 He의 경우 5[Td], SF<sub>6</sub>의 경우 35[Td], SF<sub>6</sub>+He의 경우 20[Td]이 하에서는 전리가 발생하지 않았다.

#### 4.3 부착계수

그림 6. SF<sub>6</sub>+He 가스의 부착계수Fig. 6. The attachment coefficients in SF<sub>6</sub>+He gas

전자의 부착은 전자가 중성원자 혹은 분자에 충돌하면 에너지에 의하여 전자는 원자나 분자에 포획되어 부이온을 형성한다. 부이온은 전자에 비하

여 질량이 크고 기체 중에서 전계의 가속을 받아도 높은 에너지 상태에 도달하기 어려우며 전리능력도 없다. 따라서 원자 또는 분자에 전자가 부착하여 부이온이 안정하게 존재하기 위해서는 원자, 분자가 갖는 에너지는 전자가 부착하여 감소되어야 한다.

그림 6은 순수 SF<sub>6</sub>와 SF<sub>6</sub>+He 가스의 전자 부착계수로 He과 혼합한 가스가 부착능력이 다소 저하하였으며, 낮은 E/N[Td]에서 값이 크고 높은 E/N[Td] 영역에서는 작은 경향을 나타내었다. 이것은 비탄성 충돌이 전자의 에너지를 저하시키므로 기체의 절연내력은 향상되는 것으로 생각된다. 전기적 부정 기체는 기체 중에 발생한 전자를 부착하여 부이온이 되는 경향이 크기 때문에 E/N[Td]의 증가와 더불어 감소하였다. 여기서 순수 He 가스의 부착계수는 얻을 수 있었는데, 이는 He 가스가 비활성 기체이기 때문으로 풀이된다.

#### 4.4 실효전리계수

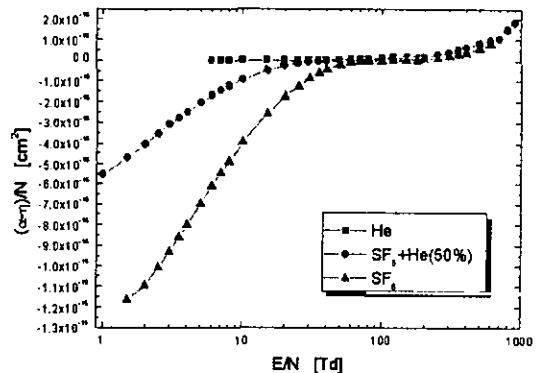
그림 7. SF<sub>6</sub>+He 가스의 실효전리계수Fig. 7. The effective ionization coefficients in SF<sub>6</sub>+He gas

그림 7은 SF<sub>6</sub>+He 가스의 실효전리계수로 그 값이 0보다 크지 못하면 효과적인 전자의 충돌 전리가 일어나지 않게 된다. 따라서 전자가 전계로부터 상당히 큰 에너지를 얻지 못한다면 전리를 일으키기 어려울 것이라는 것을 알 수 있다.

#### 4.5 에너지 분포함수

전계가 인가될 때 기체 중을 이동하는 전자군의 에너지분포함수는 전자가 전계로부터 에너지를 받고 원자 또는 분자와의 충돌에 의하여 에너지를 잃는 균형관계에서 결정되며, 전자의 각 에너지에 대한 확률밀도와 전자와 분자 사이의 각종 충돌 단

면적과 방전현상으로 나타나는 전자수송특성에 직접적으로 관련되는 중요한 물리량으로 플라즈마 프로세싱에 유용하게 이용되고 있다.

#### 4.5.1 SF<sub>6</sub>

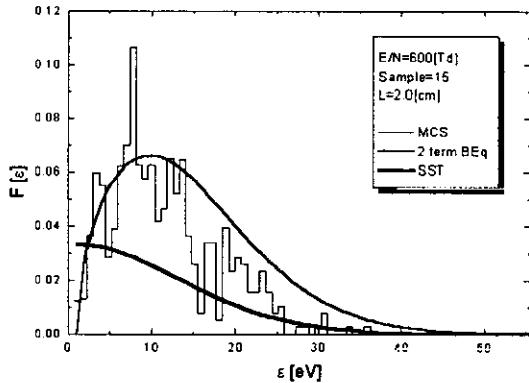


그림 8. SF<sub>6</sub> 가스 중에서의 전자에너지 분포함수

Fig. 8. The electron energy distribution function in SF<sub>6</sub> gas

그림 8은 SF<sub>6</sub> 가스에서 탄성 및 비탄성 산란을 고려하여 E/N : 600[Td]에서 전자에너지 분포함수  $F(\varepsilon)$ 를 몬테칼로 시뮬레이션법과 불츠만 방정식 법을 이용하여 나타낸 것이다. 여기로 인하여 전자의 에너지를 줄어버리게 되면 불평형 영역이 크게 나타난다. Sample(15), 거리(2[m])에서 MCS법으로 추적하여 나타난 전자에너지 분포  $F(\varepsilon)$ 는 2항 근사식에 의한 BEq와 SST의 계산값과 전반적으로 큰 차이를 나타내었다.

$F(\varepsilon)$ 의 값은 초기에너지에서는 증가하고 그 이상의 전자에너지에서는 감소하는 것이 나타났다. 이것은 전자의 에너지가 증가함에 따라  $F(\varepsilon)$ 은 감소하여 전자에너지가 43[eV]이상에서는 몬테칼로 시뮬레이션 값과 불츠만 값이 일치되고 있다. 또한 비탄성충돌에 의한 분포함수의 변화는 여기 에너지가 전자의 평균에너지보다 적음으로써 급격히 감소되어 나타나는 현상으로 생각된다.

#### 4.5.2 SF<sub>6</sub>+He

그림 9는 SF<sub>6</sub>+He(50:50) 가스에서 탄성 및 비탄성 산란을 고려하여 E/N : 400[Td]에서 전자에너지 분포함수  $F(\varepsilon)$ 를 몬테칼로 시뮬레이션법과 불츠만 방정식 법을 이용하여 나타낸 것이다.

여기에서도  $F(\varepsilon)$ 의 값은 초기에너지에서는 증가하고 그 이상의 전자에너지에서는 감소하는 경

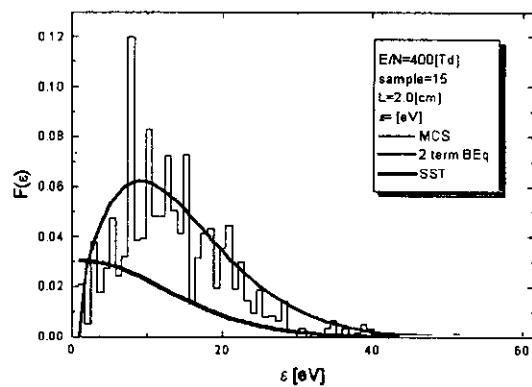


그림 9. SF<sub>6</sub> + He 가스 중에서의 전자에너지 분포함수

Fig. 9. The electron energy distribution function in SF<sub>6</sub> + He gas

향이 나타났다. 이것은 전자의 에너지가 증가함에 따라  $F(\varepsilon)$ 은 감소하여 43[eV]이상에서는 몬테칼로 시뮬레이션 값과 불츠만 값이 일치되고 있다

#### 4.5.3 He

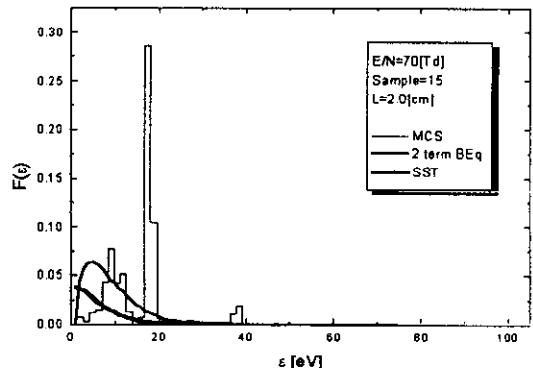


그림 10. He 가스 중에서의 전자에너지 분포함수

Fig. 10. The electron energy distribution function in He gas

그림 10은 He 가스에서 탄성 및 비탄성 산란을 고려하여 E/N : 70[Td]에서 전자에너지 분포함수  $F(\varepsilon)$ 를 몬테칼로 시뮬레이션법과 불츠만 방정식 법을 이용하여 나타낸 것이다.

Sample(15), 거리 2cm에서 MCS법으로 추적하여 나타난 전자에너지 분포  $f(\varepsilon)$ 는 2항 근사식에 의한 BEq와 SST의 계산값과 전반적으로 큰 차이를 나타내었다. He 가스의 경우에는 전자 에너지 분포가 극히 일부 에너지 영역에서 과도하게 집중되어 있음을 알 수 있다.

#### 4. 결 론

SF<sub>6</sub>+He가스의 전자충돌단면적을 이용하여 0.1≤(E/N)≤700Nm<sup>-1</sup>에서 전자군의 파라미터 특성을 전자산란의 비평형상태에서 몬테칼로 시뮬레이션의 TOF 샘플링으로 계산하였고 볼츠만법에 의해 전리, 전자이동속도를 구하였다. 전자군 수송계수의 해석결과로부터 다음과 같은 결론을 얻었다.

1. He 가스의 이동속도는 낮은 압력과 높은 전계에서 증가하므로 전자의 이동속도가 전계에 비례하고 압력에 반비례함을 입증하는 것이다. 그러나 SF<sub>6</sub>가스에서는 이러한 구분이 명확하게 나타나지 않았는데 이는 부착특성이 강한 가스 고유의 성질 때문이다.
2. 가스의 종·횡방향 특성에너지에는 잠시 구배가 낮아지는 경향이 있는데 이는 전자충돌에 의한 전리과정으로 전자가 중성분자와의 탄성충돌에 의해 자신의 운동에너지를 잃어버리기 때문이다.
3. SF<sub>6</sub>+He 혼합가스는 상당히 순수 SF<sub>6</sub> 가스와 비슷한 결과를 가지는 것으로 나타나 그 동안 고가로 사용하던 순수 SF<sub>6</sub> 가스에 여러 회가스의 첨가로 특성 및 경제성을 개선할 수 있을 것이다.
4. 현재 사용되고 있는 25.9kV G.C.B에 들어가는 순수 SF<sub>6</sub>가스를 대체하는 새로운 절연기체 개발에 MCS프로그램과 볼츠만 법을 이용한다면 많은 성과가 있을 것으로 기대된다.
5. SF<sub>6</sub>+He 혼합기체의 전자수송특성 파악으로 반도체의 박막 공정, 에칭 및 Plasma CVD의 활용에 기여할 것으로 판단된다.

#### 참고 문헌

- [1] 電氣學會 技術報告, “氣體放電 シミュレーション 法”, 第140号, pp.3-5, 1974
- [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] L. G. H. Huxley, R. W. Crompton. “The diffusion and drift of electrons in gases”, John, Wiley and sons. VOL12, pp.7-12, 1967
- [4] R. W. L. Thomas and W. R. L. Thomas, “Monte Carlo simulation of electrical discharges in gases”, J.Phys. B (Atom molec. phys.), Vol. 2, pp 2-3, 1969
- [5] 菅野卓雄, “半導體 プラズマ プロセス技術”, 産業図書, pp. 38~50, 1993
- [6] “モンテカルロ法とシミュレーション”, 培風館, pp 4-20, 1989
- [7] Philip E. Luft, “Description of a Backward prolongation program for computing transport coefficients”, JILA, Information center report, No.19, pp 10-25, 1975
- [8] Stephen M. Rossnagel, J. Cuomo, William D. Westwood, “Handbook of Plasma Processing Technology”, Noyes Publications, pp 6-13, 1990
- [9] Brian Chapman, “Glow Discharge Processes”, John Wiley & Sons, pp 5-8, 1980

#### 감사의 글

이 논문은 한국전력공사지원에 의하여 기초전력 공동연구소 주관으로 수행되었으며 이에 감사드립니다. (관리번호: 98-022)