

MCS-BEq에 의한 SF₆-He 혼합기체의 에너지 분포함수

성낙진*, 김상남
시립인천전문대학

**Energy Distribution Function for Electrons in SF₆+He mixtures gas used
by MCS-BEq**

Nak-Jin Seong, Sang-Nam Kim
Incheon City Collge

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(MCS) and Boltzmann equation(BEq) 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.

1. 서 론

산업 발전에 따라 전력 계통의 대용량화, 송전 전압의 초 고압화에 의하여 각종 전기 기기에 방전 현상이 중대한 영향을 미치게 되고 환경문제 등 여러 산업 분야에서 방전을 이용하려는 노력이 증가하고 있다. 따라서 기체 방전을 지배하는 메카니즘을 정확히 이해할 필요가 있으며 이를 위하여 이론적, 실험적 수치 해석적으로 많은 연구를 필요로 하고 있다.[1]~[7]

현재 25.9kV에서 아크 소호 매체로 쓰이고 있는 SF₆기체는 열적 화학적으로 안정된 불활성의 무독, 무색의 기체로써 이는 불소의 성질이 자유전자를 잘 물어당기기 때문에 SF₆분자는 무거운 이온이 되어 잘 움직이지 않아 우수한 절연내력을 발휘하는 것이다. 하지만 SF₆기체의 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 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+희기체 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 변화하게 되며 이것을 해석하기 위해서는 전자이동속도, 전리계수, 부착계수, 실효전리계수, 종횡방향의 확산계

수, 평균에너지 및 전자에너지 분포함수를 파악하는 것이 절실히 요구되고 있다.

이와 같은 전자 수송특성을 해석하기 위해서는 정확한 운동량 변환단면적이 필요하고 이를 갱을 이용한 전자군파라미터의 특성이 볼츠만 방정식과 몬테칼로 시뮬레이션에 의해 구해진다. 특히 몬테칼로법은 기체의 탄성 및 비탄성충돌을 고려한 비평형 상태의 비교적 높은 E/N(Td)영역의 범위에서 낮은 전리로 전자군파라미터와 전자 에너지분포함수를 해석하는 가장 우수한 방법이다.[8]~[15]

본 연구에서는 SF₆기체와 He기체의 전자에너지 분포함수를 구하기 위하여 전기 전도 특성을 나타내는 전리계수, 부착계수, 실효전리계수, 전자이동속도(W), 전자의 확산계수(ND_L) 및 평균에너지 등의 전자수송계수를 E/N[Td]:50~700[Td] (E:전계, N:기체분자수밀도, 1Td=1×10⁻¹⁷ V·cm², N:3.5353×10¹⁶cm⁻³ 0°C 1Torr에 해당)의 범위에서 볼츠만 방정식에 의한 Backward prolongation법과 비등방성 산란을 고려한 몬테칼로 시뮬레이션을 TOF샘플링에 의해서 계산한다.

2. 이 론

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.[16][17]

MCS은 확률론적인 기법을 이용하기 때문에 얻어진 결과로 부터 통계적인 분산이 생기는 단점이 있다. 때문에 신뢰되는 파라메터를 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 생

성되어 얻어지지만 TOF에서는 위치와 시간을 같이 지정하기 때문에 샘플수는 작게된다. 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.

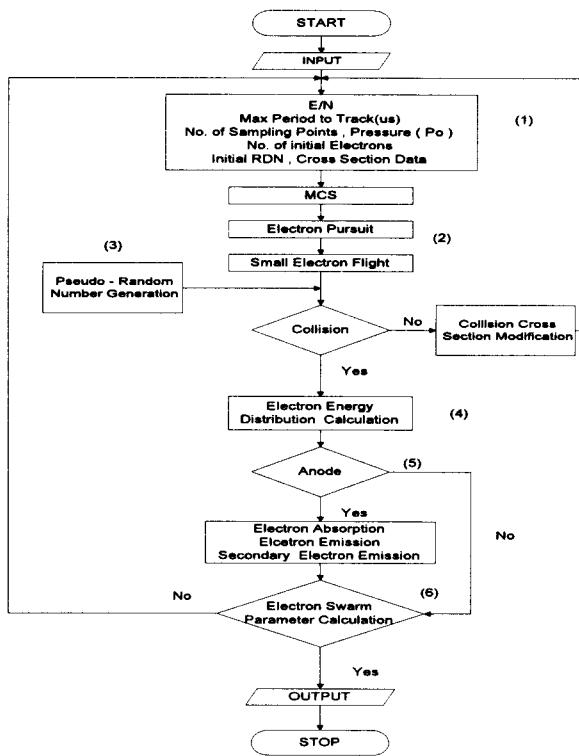


그림 2.1 몬테칼로 시뮬레이션의 순서도
Fig. 2.1 Flowchart for Monte carlo simulation

2.2 BEq법

기체중의 방전현상을 원자론적인 입장에서 보면, 상호충돌을 되풀이 하는 하전입자 즉 전자, 원자, 분자, 이온에서 성립되며, 이들 하전입자는 전자군의 속도와 위치 및 시간에 따라 분류할 수 있는데, 하전입자가 열평형 상태에 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

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

로 나타낼 수 있다.

여기에서 $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ 는 하전입자의 속도분포함수이다. 볼츠만 방정식을 간단히 정리하면 다음과 같이 정

리할 수 있다

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

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. 전자충돌 단면적

3.1 SF₆ 충돌단면적

충돌단면적은 전자의 거시적 특성을 이용하는데 기초적 자료로서 중요하다. 기체절연에서 비평형 플라즈마 응용기술에 이르기까지 각각의 경우에 필요한 기체의 종류, 상태조건(E/N, 기체밀도, 여기조건)을 파악할 수 있으며 전자수송특성에 관한 정보를 알 수 있다. 절연기체로는 여러 단면적 중에서 전리단면적(q_i)과 부착 단면적(q_a)이 중요하며 에칭기체로는 여기단면적(q_{ex})과 해리단면적이 중요하다. 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.

본 논문에서 사용한 SF₆의 전자충돌단면적을 그림3.1에 나타내었는데 이들 충돌단면적은 전자의 특성을 파악하는 기초 자료로써 상당히 중요하다. 특히 여러 단면적 중에서 절연기체에 관련된 전리와 부착단면적, 에칭에 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), 진동여기단면적(Q_v) 및 전 충돌단면적(Q_T) 등의 값은 그대로 이용하여 계산하였다.

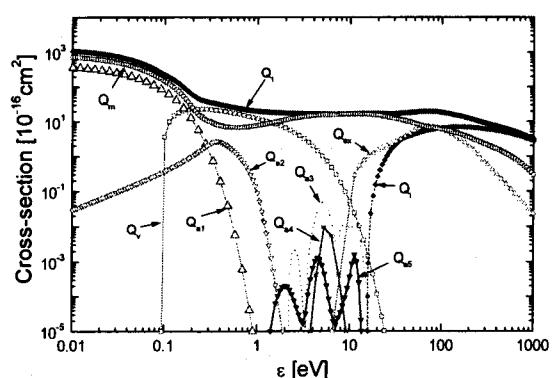


그림 3.1 SF₆기체의 전자 충돌 단면적.

Fig. 3.1 Collision cross sections for electrons in SF₆.

3.2 He 충돌단면적

본 연구에 이용한 He의 전자 충돌단면적 그림 3.2은 운동량 변환단면적(q_m), 전자 여기단면적(q_{ex}), 전리단면적(q_i)으로 구성되어 있다.

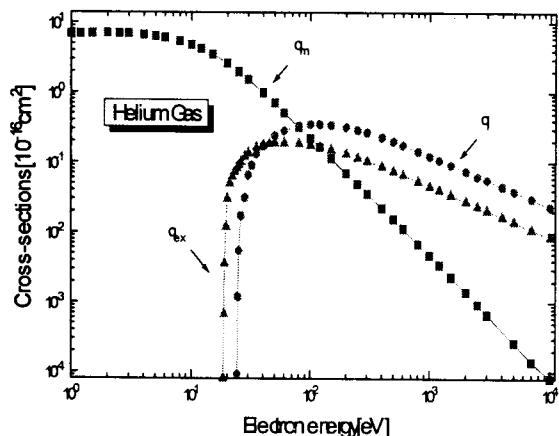


그림 3.2 He 기체의 전자 충돌단면적
Fig. 3.2 Collision cross sections of He gas

4. 결과 및 고찰

4.1 SF₆ 기체의 에너지분포함수

전계가 인가될 때 기체 중을 이동하는 전자군의 에너지 분포함수는 전자가 전계로부터 에너지를 받고 원자 또는 분자와의 충돌에 의하여 에너지를 잃는 균형관계에 결정되며, 전자의 각 에너지에 대한 확률밀도와 전자와 분자 사이의 각종 충돌단면적과 방전현상으로 나타나는 전자수송특성에 직접적으로 관련되는 중요한 물리량으로 플라즈마 프로세싱에 유용하게 이용되고 있다.[18]~[19]

그림 4.1은 SF₆ 기체에서 탄성 및 비탄성 산란을 고려하여 E/N : 600[Td]에서 전자에너지 분포함수 F(ε)를 몬테칼로 시뮬레이션법과 볼츠만 방정식법을 이용하여 나타낸 것이다.

여기로 인하여 전자의 에너지를 잃어버리게 되면 불평형 영역이 크게 나타난다.

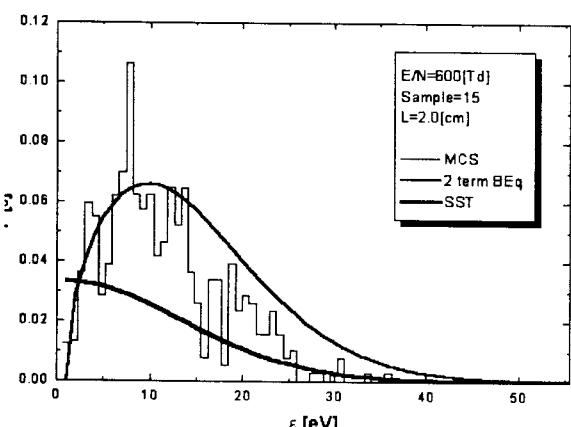


그림 4.1 SF₆ 기체 중에서의 전자에너지 분포함수
Fig. 4.1 Electron energy distribution function in SF₆ gas

Sample(15), 거리(2[m])에서 MCS법으로 추적하여 나타난 전자에너지 분포 F(ε)는 2항 근사식에 의한 BEq와 SST의 계산값과 전반적으로 큰 차이를 나타내었다.

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

4.2 He 기체의 에너지분포함수

그림 4.2는 He 기체에서 탄성 및 비탄성 산란을 고려하여 E/N : 70[Td]에서 전자에너지 분포함수 F(ε)를 몬테칼로 시뮬레이션법과 볼츠만 방정식법을 이용하여 나타낸 것이다.

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

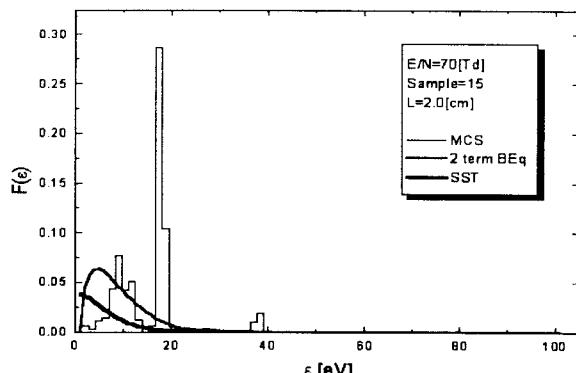


그림 4.2 He 기체 중에서의 전자에너지 분포함수
Fig. 4.2 Electron energy distribution function in He gas

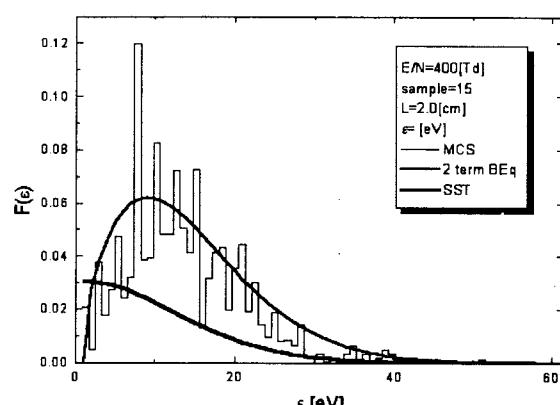


그림 4.3 SF₆-He 기체 중에서의 전자에너지 분포함수
Fig. 4.3 Energy distribution function in SF₆-He gas

4.3 SF₆-He 혼합기체의 에너지분포함수

그림 4.3은 SF₆-He(50:50) 기체에서 탄성 및 비탄성 산란을 고려하여 E/N : 400[Td]에서 전자에너지 분포함수 F(ε)를 몬테칼로 시뮬레이션법과 볼츠만 방정식법을 이용하여 나타낸 것이다.

여기에서도 F(ε)의 값은 초기에너지에서는 증가하고 그 이상의 전자에너지에서는 감소하는 경향이 나타났다. 이것은 전자의 에너지가 증가함에 따라 F(ε)은 감소하여 43[eV]이상에서는 몬테칼로 시뮬레이션 값과 볼츠만 값이 일치되고 있다

5. 결 론

SF₆-He기체의 전자충돌단면적을 이용하여 0.1 ≤ (E/N) ≤ 700 범위에서 전자군의 파라미터 특성을 전자산란의 비평형상태에서 몬테칼로 시뮬레이션의 TOF 샘플링으로 계산하였고 볼츠만법에 의해 전리, 전자이동속도를 구하였다. 전자군 수송계수의 해석결과로부터 다음과 같은 결론을 얻었다.

1. He 기체의 이동속도는 낮은 압력과 높은 전계에서 증가하므로 전자의 이동속도가 전계에 비례하고 압력에 반비례함을 입증하는 것이다. 그러나 SF₆기체에서는 이러한 구분이 명확하게 나타나지 않았는데 이는 부착특성이 강한 기체 고유의 성질 때문이다.
2. 기체의 종·횡방향 특성에너지는 잠시 구배가 낮아지는 경향이 있는데 이는 전자충돌에 의한 전리과정으로 전자가 중성분자와의 탄성충돌에 의해 자신의 운동에너지를 잃어버리기 때문이다.
3. SF₆-He 혼합기체는 상당히 순수 SF₆ 기체와 비슷한 결과를 가지는 것으로 나타나 그 동안 고가로 사용하던 순수 SF₆ 기체에 여러 희기체의 첨가로 특성 및 경제성을 개선할 수 있을 것이다.
4. 현재 사용되고 있는 25.9kV G.C.B에 들어가는 순수 SF₆기체를 대체하는 새로운 절연기체 개발에 MCS프로그램과 볼츠만 법을 이용한다면 많은 성과가 있을 것으로 기대된다.
5. SF₆-He 혼합기체의 전자수송특성 파악으로 반도체의 박막 공정, 에칭 및 Plasma CVD의 활용에 기여할 것으로 판단된다.

본 연구는 시립인천전문대학 교내 연구비 지원에
의한 논문임

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] 電氣學會技術報告, “氣體放電シミュレーション技法” 第140號, 1974.
- [7] 谷口敏幸 et al., “ボルツマン方程式による運動量変換断面 繰推定に關して.” 放電研究會資料, ED-86-11 6, pp. 39~49, 1986.
- [8] Flamm D. L., " Plasma Processing of Semiconductors " Williams P F, NATO ASI series, pp.1~22, 1997.
- [9] 小沼光晴著 “プラズマと成膜の基礎”, 日刊工業新聞社, pp. 13-20, 1993.
- [10] 武田進, “氣體放電の基礎”, 東明社, pp. 24-25, 1974.
- [11] 奥田孝美, “氣體プラズマ現象”, コロナ社, pp.21-33, 1975.상
- [12] 山本賢三, 奥田孝美, “電離氣體”, コロナ社, pp.161-197, 1977.
- [13] 武田進著, “プラズマの基礎”, 朝倉書店, pp.17-58, 1976.
- [14] 森正武, “Fortran 77 數值計算 プログラミング” (岩波書店), pp. 41-44, 1995.
- [15] モンテカルロ法とシミュレーション(培風館), 1989.
- [16] 市川行和, 高柳和夫, 島村勲, “衝突の理論(上下)”, 吉岡書店, pp. 192, 1975.
- [17] 高柳和夫, “電子, 原子, 分子の衝突”, 培風館, pp.51-69, 1978.
- [18] 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
- [19] Y. Nakamura and M. Kurachi "Electron Transport Parameters in Argon and its momentum transfer cross section" J. Phys. 21, pp.718-723, 1988

참 고 문 헌

- [1] H. Itoh, Y. Miura, N. Ikuta, Y. Nakao and H. Tagashira, " Electronswarm development in SF₆ : I.Boltzmann equation analysis" Phys. D:Appl.Phys 21, pp.922- 930, 1988.
- [2] H. Itoh and T.Musha "Monte Carlo Calculations