2011년도 대한전기학회 하계학술대회 논문집 2011. 7. 20 - 22

# 플라즈마 방전 시뮬레이션에 의한 $CF_3I$-Xe 혼합 가스에서의 물성 특성 연구

**심응원***, 도안뚜안, 전병훈
동국대학교

# A Study on Characteristics of The $CF_3I$-Xe Mixtures gases in a Plasma Discharge Simulation

Eung-Won Shim*, Do Anh Tuan, Byung-Hoon Jeon
Dongguk University

**Abstract** - Recently, it has been found that trifluoroiodomethane ($CF_3I$) gas can replace $SF_6$ gas as a prospective substitute gas. For quantitative understanding of gas discharge phenomena, we should know electron collision cross sections and electron transport coefficients. Using electron collision cross sections of $CF_3I$ and Xe, we calculated elecron drift velocity, longitudinal coefficient, effective ionization coefficient in $CF_3I$-Xe mixtures using a two-term approximation of the Boltzmann equation. We also compared the electron transport coefficients in pure gas and those of 10%, 20%, 50%, and 70% $CF_3I$-Xe mixture gases. The present data may be showed appropriate ratios of $CF_3I$-Xe mixture gas for replacing the $SF_6$ gas.

## 1. 서 론

현재 반도체 제조 공정 및 절연용 아크 소호 매체로 쓰이는 $SF_6$분자 가스는 우수한 절연 능력과 안전성을 갖고 있다. 그럼에도 불구하고 온난화지수(GWP, Global Warming Potential)가 23900으로 매우 크고 대기 중에서 분해 되는 시간이 3200년이나 되기 때문에 점차 그 사용에 곤란함을 겪고 있다. 반면에 $CF_3I$는 역시 PFC계 가스 이기는 하나 GWP값이 5미만이고 대기중 분해 시간이 0.005년으로 $SF_6$가스에 비해 현저히 낮으므로 $SF_6$의 대체 물질로써 상대적으로 온난화 지수가 현저히 낮은 $CF_3I$가스를 선정한다.

그러나 $CF_3I$순수 가스는 0.5MPa에서 끓는점이 25°C로 이 상태에서는 사용이 불가능하여 타 가스와 혼합을 통해 그 끓는 점을 낮춰야 할 필요가 있다. 예를 들어 30%/70%, $CF_3I$-$CO_2$혼합가스의 경우 0.5MPa에서 끓는 점이 -12°C까지 내려가는 것을 볼 수 있다.[1]

Xe가스는 원소주기율표 상에서 5주기 18족에 속하는 비활성 기체로 단원자 분자로 존재 하며 반응성이 매우 낮고 안정된 상태이며 전기음성 친화도가 높아 $CF_3I$가스와의 혼합 물질로 선정하였다.

따라서 본논문은 $CF_3I$ 가스와 Xe 가스의 전자 충돌 단면적을 이용해 2항 근사 볼츠만 방정식을 이용하여 그 물성적 특성을 연구한다. 또한 전자 충돌 단면적을 기준으로 $SF_6$가스와 $CF_3I$, $CF_3I$-Xe 혼합 가스의 특성 비교를 통해 $CF_3I$-Xe 혼합가스의 대체 물질로써 적합한 혼합비를 선정한다.

## 2. 2항 근사 볼츠만 수치해석 방법

기체 중에서 하전입자군의 수송계수를 측정하는 방법에는 2항근사, 다항근사 볼츠만 방정식과 몬테칼로 시뮬레이션 기법 이렇게 3가지 방법이 있다.

그 중에서 볼츠만 방정식은 열평형 상태에서가 아닌 다입자계 운동의 기술을 이용해 이것을 전자군의 거동 해석에 이용하고 있다. 볼츠만 방정식 해석에서는 전자의 거동을 분포함수라고 하는 거시적 형태로 표시하고, 이 분포함수에서 전자수송계수를 산출한다. 이 방법은 충돌의 확률적인 성질을 기초로 하여 전자군 발달의 통계적 변동은 나타나지 않으며, 통계시간은 비교적 짧다. 그러나 미적분방정식으로 된 볼츠만 방정식은 일반적으로 그 해를 구하는 것이 어렵고, 종래 많이 사용되어 왔다. 전자의 속도분포함수를 Legendre 급수로 전개하여, 그 최초의 2항에 근사하는 2항근사는 전자의 속도분포함수에 비등방성이 강한 경우에는 정확한 전자수송계수를 산출할 수 없는 단점을 가지고 있다.

다음은 본 연구에서 이용된 2항근사 볼츠만 방정식에서 TOF(Time of flight)방법을 이용한 전자수송계수 산출을 보여주고 있다.

TOF에서는 위치와 시간을 함께 지정하기 때문에 샘플 수는 적고 한편으로 에너지 분포를 구할 때 샘플 수는 차츰 적어져 통계적 변동을 다수 포함한 결과로 되기 쉽다. 전자 수를 많이 택하면 전자계산기의 계산시간도 그에 비례하여 증가하므로 이것을 보완하기 위하여 순수한 관측 법에서의 차이를 지정하는 영역에서 어느 정도의 폭을 갖게 한다. TOF셈플링법으로 방전공간의 전자 이동속도, 확산계수 평균에너지를 구하기 위해서는 시간 $t_k$, $t_{k+1}$에서 전자의 샘플 수를 $M_k$, $M_{k+1}$로 하고 위치영역을 $Z(t_k)$로 할 때 시간 $t_k$에서의 전자군 중심의 평균위치 $<Z(t_k)>$는 다음과 같이 식 2.1로 나타낸다.

$$< Z(t_k) > = \frac{1}{M_k}\sum_{j=1}^{M_k} Z_j(t_k) \qquad 2.1$$

전자군의 중심이동속도 W는 다음과 같다.

$$W = \frac{\langle Z(t_{k+1})\rangle - \langle Z(t_k)\rangle}{(t_{k+1} - t_k)} \qquad 2.2$$

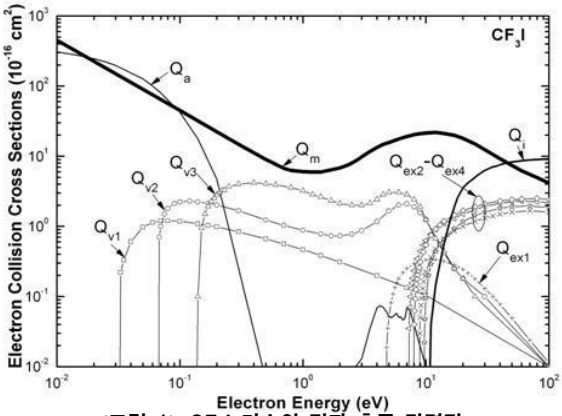
한편 전자의 확산계수는 시간 $t_k$일 때 전자의 전계 방향의 중심위치를 $Z_m(t_k)$라 하면, 종방향확산계수 $D_L$은 전자의 전계 방향의 위치분산으로 표현하여 아래의 식과 같이 표현하고, 시간에 대한 기울기로 그 값을 구할 수 있다.

$$\frac{1}{2!M_k}\sum_{j=1}^{M_k} Z_j - Z_m(t_k)^2 \qquad 2.3$$

## 3. 전자 충돌 단면적

전자-원자 충돌의 연구는 1921년의 Ramsauer에 의한 전단면적의 측정에서부터 시작되었다. 이는 희가스원자의 단면적이 낮은 에너지 범위에서 극소치를 가지고 있음을 보여주고 있다. 이 사실은 1922년에 Townsend와 Bailey에 의한 전자군 실험에 의해서도 보여주고 있다.[2]

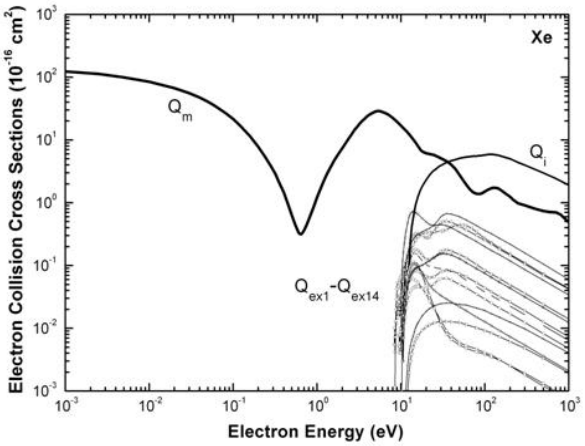
이 Ramsauer-Townsend 효과는 원자, 분자의 구조에 관한 정보를 얻고, 여러 가지 충돌이론에 대한 데이터를 얻으며 레이저, 플라즈마 등에 관한 단면적 데이터에 대한 요구가 늘어난 것이 급속하게 진보하게 된 원인이 되고 있다.




**<그림 1> $CF_3I$ 가스의 전자 충돌 단면적**

본 논문에서 사용한 $CF_3I$ 순수 가스와 $CF_3I$-Xe 혼합 가스의 물정석 특성 비교를 위해 $CF_3I$와 Xe 각각의 Cross section set를 <그림 1>과 <그림 2>에 나타내었다. $CF_3I$ 전자충돌단면적은 운동량변환단면적(Qm)과 부착단면적(Qa), 각각 0.032 ,0.067 ,0.134eV의 threshold값을 갖는 진동여기단면적(Qv1-Qv3)을 4.7, 7.2, 7.9, 8.8, 9.6eV의 threshold를 갖는 전자여기단면적(Qe1-Qe5)과 10.2eV threshold값을 갖는 전리단면적으로 구성되고 있다.[3]

Xe은 단원자 분자로 존재하므로 <그림 2>의 전자 충돌 단면적에서는 운동량 변환 단면적(Qm)과 8.315-11.58eV사이의 threshold값을 갖는 전자 여기 단면적(Qex1-Qex14), 12.13eV의 threshold값을 갖는 전리단면적으로 보여지고 있다.[4]



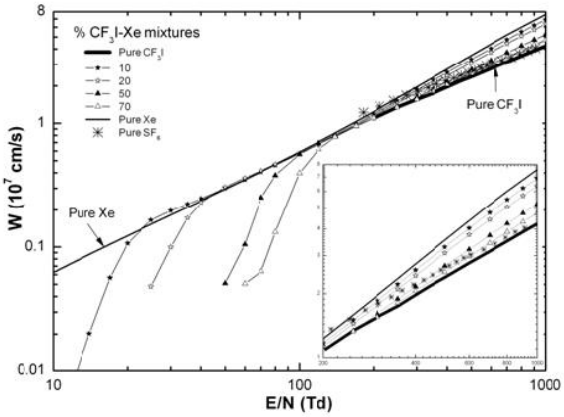

〈그림 2〉 Xe 가스의 전자 충돌 단면적

## 4 전자수송계수 해석

전자이동속도, 종축확산계수, 실효전리계수를 1torr, 300K의 조건에서 2항근사볼츠만 방정식을 이용한 시뮬레이션 기법으로 계산하였다.

### 4.1 이동속도

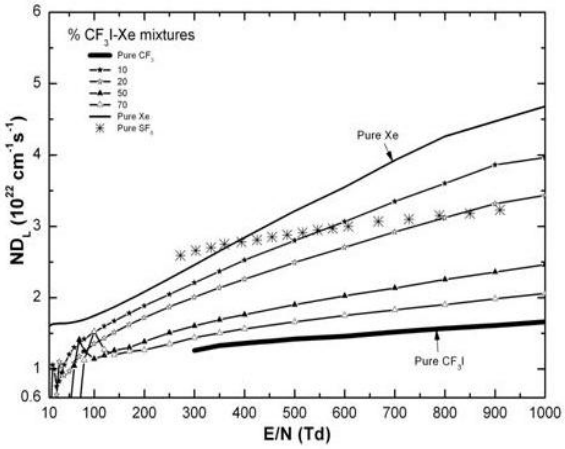
<그림 3>은 $CF_3I$와 Xe가스 각각의 전자 충돌 단면적을 토대로 볼츠만 2항근사 방정식을 사용하여 0%, 10%, 20%, 50%, 70%의 $CF_3I$-Xe 혼합가스 전자 이동 속도를 $SF_6$가스와 비교한 그래프 이다. $SF_6$의 전자수송계수 값은 T. Aschwanden의 논문 측정값을 기준으로 한다.[5] 각각의 전자 이동속도는 대체로 Xe가스의 값과 대체로 동일하나 200Td부근에서부터 미소한 차이를 나타냄을 볼 수 있다.




〈그림 3〉 $CF_3I$-Xe 혼합 가스의 이동 속도 비교

### 4.2 종축확산계수

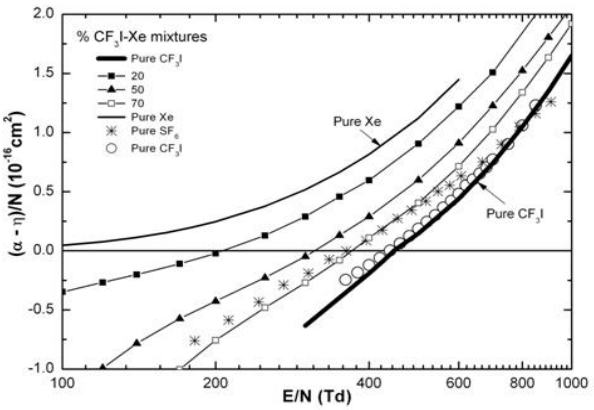
종축확산계수($ND_L$)은 순수$CF_3I$가스와 $SF_6$가 E/N값의 변화에 $ND_L$값의 변화가 미미한 상태로 가장 비슷한 특징을 나타낸다. 반면 $CF_3I$-Xe혼합가스의 경우 Xe가스의 $ND_L$에 의해 상대적으로 E/N값의 상승에 따른 변화가 크다는 것을 알 수 있다.




〈그림 4〉 $CF_3I$-Xe 혼합 가스의 종축확산계수 비교

### 4.3 실효전리계수 비교

<그림5>는 2항근사 볼츠만 방정식을 이용하여 실효전리계수를 계산한 값이다. 순수 $CF_3I$ 가스의 절연파괴 전압값이 가장 높고 Xe의 혼합비가 커질수록 점차로 절연파괴 전압값이 낮아 지는 것을 볼 수 있다. 또한 70%-30% $CF_3I$-Xe 혼합비에서 $SF_6$가스의 절연파괴 전압과 가장 유사한 값을 갖는 것을 확인할수 있다.




〈그림 5〉 $CF_3I$-Xe 혼합 가스의 실효전리 계수 비교

## 5. 결 론

목적에 맞는 플라즈마의 정량적 해석을 위해 2항 근사 볼츠만 수치해석법을 이용한 컴퓨터 시뮬레이션 계산은 효과적인 수단이 된다. 또한 그러기 위해서는 목적가스의 전자충돌단면적과 전자수송계수의 정확한 이해와 해석이 꼭 필요함을 알 수 있다.

본 논문에서는 $CF_3I$-Xe혼합기체가 $SF_6$가스의 대체물질로서 적합한지의 여부를 판단하기 위해 연구되었다. $CF_3I$-Xe 혼합가스의 물성적 특성을 이해하기 위하여 $CF_3I$와 Xe 순수 가스에 대한 전자 충돌 단면적을 활용하였고, 이를 기초로 2항근사 볼츠만 수치해석법을 이용해 시뮬레이션하여 $CF_3I$-Xe 혼합기체의 전자 이동속도와 종축확산계수, 실효전리계수를 계산하였다. 또 각각의 전자수송계수에 대해 10%, 20%, 50%, 70%, 100%에서의 특성을 비교하여 나타냄으로써 $CF_3I$-Xe 혼합가스가 $SF_6$ 가스와 어떠한 혼합비에서 유사한 특성을 지니는 바를 판단하였다. 그 계산된 $CF_3I$-Xe혼합가스의 물성적 특성은 실효전리계수의 계산결과를 기준으로 절연체로서 $CF_3I$-Xe이 70%-30%에서 $SF_6$가스와 가장 유사한 특성을 나타냄을 확인하였다.

현재 $CF_3I$ 가스가 대표적 온난화 가스인 $SF_6$ 가스의 대체물질로서 우수한 성능을 나타내고 인체에 무해한 점은 확인된 바이나 $CF_3I$ 순수 가스는 상온에서 활용하기 어려워 혼합상태로 사용이 이루어지며, $SF_6$ 가스와 비교하여 그 가격이 비싸다. 그렇기 때문에 $CF_3I$와 혼합되는 가스에 대한 연구가 더 활발할 것이 요구 되어 지며, 대체되었을 때 발생하는 비용적인 측면의 차이도 고려해야 할 것이다.

## [참 고 문 헌]


[1]Y.-Y. Duan, M.-S. Zhu and L.-Z.Han, "Experimental vapor pressure data and a vapor pressure equation for trifluoroiodomethane(CF3I)", Fluid Phase Equilibria, Vol.121, pp. 227-234, (1996) as quoted in H.kasuya, Y.Kawamura, H.Mizoguchi, Y.Nakamura, S.Yanabu and N.Nagasaki, " Interruption Capability and Decomposed Gas Density of CF3I as a Substitute for SF6 Gas", IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation, Vol. 17, No.4, 2010

[2]B. H. Jeon, J. J. Park and S. C. Ha. "The Study of Electron collision cross sections and electron transport coefficients in gases", J. of KIIEE, pp. 11-14, 2002

[3]M. Kimura and Y. Nakamura, "Electron swarm parameters in CF3I and a set of elecrron collision cross section for the CF3I molecule", J. Phys. D 43, 145202-1, 2010

[4]T. Hashimoto and Y. Nakamura, Papers of Gas Discharge Technical Committee ED-90-61 (Japan: IEE) (1990) as quoted in M. Suzuki, T. Taniguchi, N. Yoshimura and H. Tagashira, J. Phys. D 25, 50 (1992).

[5]T. Aschwanden, "Eidgenössische Technische Hochschule Zürich", Ph.D. Thesis, (1985), from Ref. 3.