

시뮬레이션에 의한 SF₆-He 혼합기체에서 전자에너지 분포함수

Electron Energy Distribution Function in SF₆-He Gas by Simulation

김 상 남^{*}
(Sang-Nam Kim)

Abstract - This paper describes the electron transport characteristics in SF₆-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 SF₆-He gas at a range of E/N. A set of electron collision cross section has been assembled and used in Monte Carlo simulation to predict values of swarm parameters. The result of Boltzmann equation and Monte Carlo Simulation has been compared with experimental data by Ohmori, Lucas and Carter. The swarm parameter from the swarm study are expected to sever as a critical test of current theories of low energy scattering by atoms and molecules.

Key Words : MCS, BEq, Electron energy distribution function, SST(Steady State Townsend)

1. 서 론

SF₆가스는 고압차단기에서 아크소호매체로 사용되는 열적 화학적으로 안정된 불활성의 무독, 무색의 기체로써 우수한 절연내력을 가지고 있다. 그러나 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 해석하는 것이 현재 일본과 국내에서도 진행되고 있다. 그러나 국내에서는 대부분 단일 절연기체를 이용하여 임계절연 파괴강도에 관한 연구가 실험적, 이론적으로 되었을 뿐 SF₆-희가스 혼합기체 중에서의 전자수송 특성에 관한 연구는 거의 미흡한 실정에 있으며 더욱이 기체 방전 현상으로 전리되는 플라즈마 프로세싱에 관한 연구는 더욱 미흡한 실정이다. 플라즈마 여기 반응을 응용하는 플라즈마 프로세싱은 플라즈마 CVD(Chemical Vapor Deposition), 플라즈마 에칭(Etching), 반응성 이온 에칭, 플라즈마 증합, 플라즈마 산화·질화, 탄소피막 생성 등 광범위한 연구가 행하여지고 있으며 이를 이용한 반도체 소자, 공구코팅, 광학부품의 코팅 등 새로운 응용분야가 개척되고 있다[1]. 특히 공정의 미세화, 저온화의 필요성 때문에 플라즈마 공정이 종래의 공정을 대체하고 있으며 경우에 따라서는 플라즈마 만이 제공할 수 있는 물질이나 환경을 이용하

기 위한 응용분야가 점점 더 확대되어 가고 있다[2].

본 연구에서는 SF₆와 He가스의 절연내력특성과약을 목적으로 전기전도특성을 나타내는 전자이동속도(W), 전자의 종·횡방향 확산계수(ND_L, ND_T), 전자의 종·횡방향특성에너지(D_L/μ, D_T/μ), 전리(α/N), 부착(η/N), 실효전리계수(α-η/N), 평균에너지($\bar{\epsilon}$) 등의 전자군 수송 파라미터를 E/N : 0.1~900[Td](E : 전계, N : 기체 분자수 밀도, 1[Td] = 1×10⁻¹⁷[V·cm²], N = 3.5353×10¹⁶[cm⁻³], 0[°C], 1[Torr]에 해당)의 범위에서 비등방성 산란을 고려한 몬테칼로 시뮬레이션과 볼츠만 방정식의 Backward Prolongation법에 의해서 계산, 해석하여 전자에너지 분포함수(f(ε))를 구하였다. 그 결과를 실험치와 비교, 검토하여 이용한 충돌단면적의 타당성과 시뮬레이션의 활용 가치를 입증한다[3][4].

전기적으로 많은 중성적인 입자가 무질서한 상태로 운동하고 서로 충돌하는 복잡한 상태에 있는 기체는 원자, 분자 그리고 전자에 관한 연속적인 반응에서 약전리 플라즈마의 특성을 이해하는 것이 플라즈마의 상세한 모델을 설정하는데 중요하다. 본 연구에 의해 산출된 전자군 파라미터는 시뮬레이션에 있어서 약전리 플라즈마의 많은 정보뿐만 아니라 특히 전자와 원자, 분자들 사이의 상호작용에 의한 저에너지 영역의 전자산란은 중요한 데이터로 활용이 가능하다.

이러한 계산의 결과로부터 전자수송계수를 Crompton과 Ali등의 실험값과 계산값을 비교 검토하여 몬테칼로 시뮬레이션(이하 MCS)과 볼츠만법(이하 BEq)에 이용된 전자충돌 단면적의 타당성을 입증하였다.

전력사용량과 발전량의 증대에 따라 전력기기들의 대용량화 초고압 화에 따라 절연문제의 연구가 절실함에 따라 이러한 계산과 검토에 의해 산출된 전자수송계수는 전자와 원

^{*} 교신저자, 시니어회원 : 인천대학교 전기공학과 교수·공학

E-mail : sn7332@incheon.ac.kr

접수일자 : 2014년 1월 4일

수정일자 : 2014년 2월 21일

최종완료 : 2014년 2월 25일

자, 분자들 사이의 상호작용에 의한 저 에너지 영역의 전자 산란의 중요한 자료로서 활용이 기대되어 진다.

2. 해석방법

2.1 몬테칼로 시뮬레이션

모나코의 카지노 게임도시인 Monte Carlo에서 이름이 유래된 MCS은 확률분포에 있어서 난수 선택에 기초한 실험적 수학의 한 분야로 불규칙적인 운동을 모델화 한 기법으로 매우 다양한 문제를 전자계산기에 발생시켜 Random한 실험결과를 해석하는데 유용한 수학적 모의 방법이다.[3]

MCS은 2차 대전기간 동안에 원자탄 개발을 위한 중성자 수송에 관련된 문제를 해결하기 위한 목적으로 많은 과학자들에 의해 연구, 발전되어왔다. 다양한 응용분야에서의 MCS 중에서 기체중의 전자의 거동에 관한 MCS는 H. Itoh, M. Musha 및 R. W. L. Thomas, W. R. L. Thomas 에 의해서 최초의 연구가 시작되었다[5]~[9].

MCS은 난수를 이용하여 충돌의 종류, 산란후의 방향 및 비행시간 등을 결정하면서 전자의 운동을 반복 추적한다. 또한 전자군의 성질을 조사하기 위한 몬테칼로 법은 전자계내의 전자 운동 상태와 분자의 충돌 산란 확률을 고려하여 전자, 이온의 상태량을 추적하는 것을 기본으로 하여 입자를 확률 현상의 난수로 모의하는 방법을 말한다. 사용하는 난수는 컴퓨터에서 발생하는 [0~1]사이의 의사난수이다.

MCS은 우발현상의 경과로 나타나는 다수의 난수를 사용하여 수치적, 모형적으로 실현시켜 관측함으로써 문제의 근사해를 얻는 방법이다. 원자로에서 중성자의 차폐 효과 (shielding effect), 표본 분포 등의 문제를 이 방법으로 사용하면 간단하게 처리 할 수 있고 직관적으로 이해 할 수 있는 장점이 있다[7].

본 연구에서는 방전공간내의 전자군의 성질을 해석하기 위해 다수의 난수를 이용하여 전자계산기 내부에서 발생한 의사난수를 반복 계산하여 실험결과를 해석하는 것으로 본 연구의 기본이론은 기체방전 시뮬레이션을 이용하여 각종 파라미터를 전자의 평균에너지와 전자의 위치 및 시간의 함수로서 추적하였다[5]. 그리고 전자사태에서 나타나는 개개의 전자를 추적하여 방전의 파라미터의 동향을 조사하였다.

전자의 물리량을 가상적으로 샘플링하고 하전입자의 운동을 분석하여 전자군의 파라미터 값을 확률적으로 결정하는 것이다. 전계가 존재하는 공간의 방전 메카니즘에 있어서 전자는 전계에 의해서 높은 에너지를 갖게 되어 전자에너지가 불평형상태가 되므로 전자에너지분포를 추정하기는 매우 어렵다. 따라서 이러한 불평형 상태에서 전자에너지분포를 산출할 수 있는 MCS는 매우 유용하다.

기체방전의 해석에 이용되는 MCS는 컴퓨터에서 발생된 다수의 난수를 이용하여 대상을 확률적으로 해석하는 방법이다. 전자군의 수송특성을 해석하는 방법은 전계가 존재하는 방전공간에서 개개의 전자운동을 계산하는 기법과 얻어진 데이터에서 필요한 형식으로 적당한 샘플링을 행하여 전자군의 특성을 계산하는 기법으로 구성된다.

2.2 볼츠만 시뮬레이션

본 논문에서는 볼츠만 방정식을 이용한 수치해석기법을

사용하여 입력 Data로 기체의 운동량 변환단면적, 전리 단면적, 부착 단면적등을 이용하여 기체의 전자기동속도, 확산 계수, 전리계수, 부착계수, 실효전리계수와 실효전리계수 값을 이용한 임계 E/N의 값을 구할 수 있다.

볼츠만 시뮬레이션은 각각의 E/N에 대하여 분포함수의 최대 에너지 값 (ϵ_{max})을 찾아내서 그 ϵ_{max} 값을 3,000등분으로 분할하고 각 등분마다 분포함수를 산출하여 전자에너지 분포함수를 구하고 이 분포함수로부터 각종 수송계수를 산출해낸다.

그림 1은 본 논문에서 사용된 볼츠만 방정식 수치해석기법에 대한 Flow Chart를 나타내고 있다.

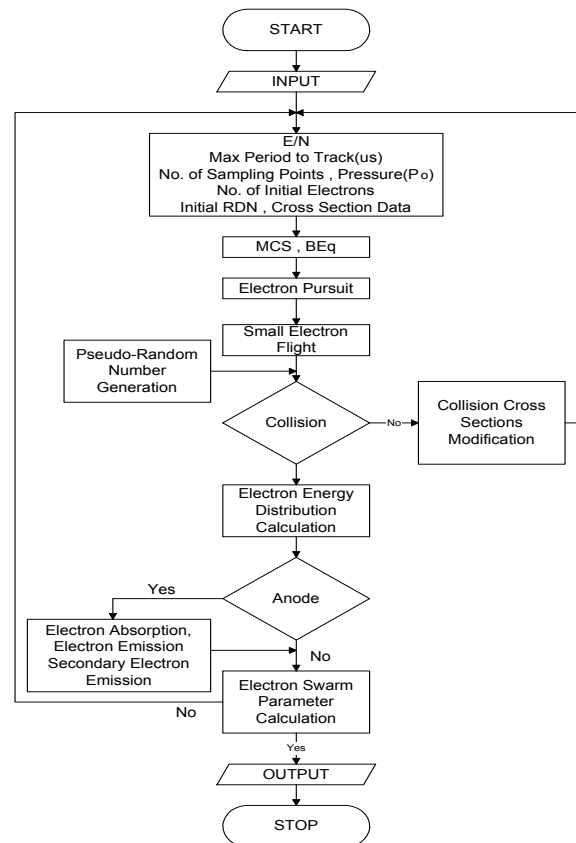


그림 1 볼츠만 시뮬레이션의 순서도

Fig. 1 Flowchart of Boltzmann equation simulation

위 Flow chart의 내용은

- (1) 실험과 각종 참고문헌에서 참조한 충돌 단면적을 입력하고 loop 반복 횟수를 결정한다.
- (2) 전리 충돌항의 제 1항과 탄성 충돌항의 제 1항을 계산한다.
- (3) 비탄성 제 2충돌 항은 첫 번째 loop에서 낮은 에너지 분포함수로 계산하고 두 번째 loop 이후부터 계산한다.
- (4) $F(\epsilon)$ 에 의해 $D(\epsilon)$ 을 계산한다.
- (5) 수치해석기법에 의해 $F(\epsilon)$ 을 계산한다.
- (6) 구해진 에너지 분포함수를 $\int_0^{\infty} \epsilon^{1/2} F(\epsilon) d\epsilon = 1$ 에 의해 정규화 한다.

(7) 구해진 충돌 단면적 Q 값과 반복 loop에서의 Q 값을 비교하여 그 차이가 주어진 조건에 합당한가를 판단한다.

(8) 확정된 $F(\epsilon)$ 값을 이용하여 각종 전자수송계수를 계산한다.

3. 전자충돌 단면적

충돌단면적은 전자의 거시적 특성을 이해하는데 기초적 자료로서 중요하다. 가스절연재료 및 비평형 플라즈마 응용 기술(광원, 레이저, 박막에칭, 방전화학, 환경보전, 정전기, 방사선검출기 등)에 이르기까지 각각의 경우에 필요한 가스의 종류, 상태조건(E/N, 가스밀도, 여기조건 등)에 관계되는 여러 가지 전자특성에 관한 정보를 알 수 있다. 절연가스로 사용되는 경우는 여러 단면적중에 전리단면적(q_i)과 부착단면적(q_a)이 중요하며 에칭가스로는 여기단면적(q_{ex})과 해리단면적(q_d)이 중요하다.

인가한 기체분자에 대한 전자의 충돌 단면적은 전자에너지의 영향을 받는다. 그러므로 기체분자의 여기, 해리, 이온화 등의 반응을 여기단면적, 해리단면적, 이온화단면적 등으로 나타내며 전충돌 단면적은 개개의 반응과정의 합으로 표현한다. 입자간의 상호충돌작용으로 나타난 기체분자의 운동량 변환단면적(q_m), 진동여기단면적(q_{v13} , q_{v24}), 전리단면적(q_i), 전자부착단면적(q_a), 해리단면적(q_d) 및 여기단면적(q_{ex}) 등이 있으며 본 논문에서 사용한 운동량변환단면적은 Crompton[10], Kitamori [4]과 Kline[3] 등에 의한 전자 Beam 실험값으로 구성되었다.

운동량변환단면적 q_m 은 탄성충돌을 위한 것이 아니라 비탄성 충돌을 위한 운동량 변환단면적으로 전체적인 운동량 변환단면적을 나타낸다. 메탄분자는 전자군 상태에서 9가지의 진동모드를 가지고 있다. 하지만 이것들 중 4가지만 다른 에너지를 가지고 있다. 4가지 상태의 에너지 정량은 $v_1=362$ [meV], $v_2=190$ [meV], $v_3=374$ [meV], $v_4=162$ [meV] 이고 에너지순실 스펙트럼에 불충분한 에너지 분해진동모드 q_{13} , q_{24} 를 취급한다.[4] 전리단면적은 $e < 15$ [eV]을 제외한 영역에서는 W. E. Bies[3]과 Hunter[11]에 의해 얻어진 전체 전리단면적이 적용되었으며 $e < 15$ [eV]의 영역에 대해서는 Haddad [12]의 Data를 적용하였다.

전자부착단면적(q_a)은 실제적으로 그 값이 너무 작기 때문에 전자수송계수에 거의 영향을 주지 않는다. 해리 단면적에 대해서는 Walker[12]와 Kline, W.E. Bies[13]의 실험 결과치를 적용하였다[14]~[16].

3.1 SF₆ 충돌단면적

그림 2의 SF₆ 전자충돌단면적은 다른 원자, 분자에 비하여 매우 큰 전자부착 단면적(Q_{a1} , Q_{a2})이 낮은 에너지 영역에 존재하고 또한 해리성 부착단면적(Q_{a3} , Q_{a4} , Q_{a5})의 Treshold 에너지의 값은 각각 3.29(eV), 3.95(eV), 1.57(eV)를 이용하였다.

3.2 He 충돌단면적

본 연구에 이용한 He의 전자충돌단면적 그림 3은 운동량 변환단면적(q_m), 전자 여기단면적(q_{ex}), 전리단면적(q_i)으로 구성되어 있다.

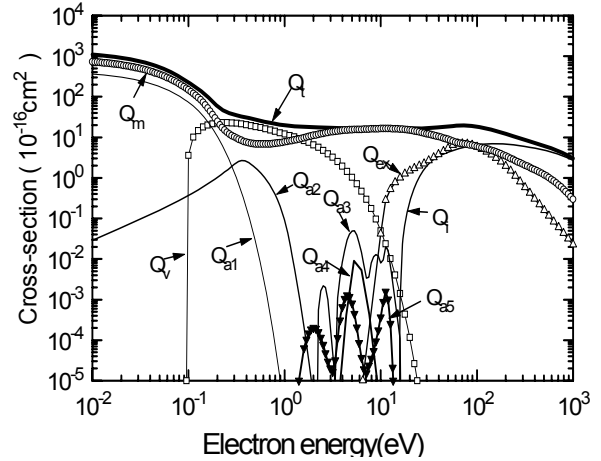


그림 2 SF₆ 기체의 전자 충돌 단면적

Fig. 2 collision cross section of electrons in SF₆ gas

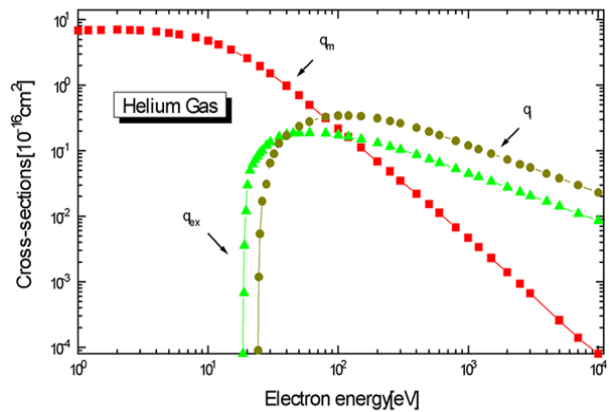


그림 3 He 가스의 전자 충돌 단면적

Fig. 3 collision cross section of electrons in He gas

4. 해석결과 및 고찰

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

전자 에너지 분포는 어떤 조건에서 전자의 각 에너지에 대한 확률 밀도와 전자와 분자 사이의 각종 충돌 단면적과의 방전현상으로 나타나는 전자수송 특성에 관련된 물리량이다. 그 때의 하전입자는 여러 종류의 에너지 성분을 갖는 기체 분자가 열평형 상태 즉, Maxwell-Boltzmann 에너지 분포를 나타낸다[10][11].

4.1.1 SF₆ 에너지 분포함수

그림 4는 SF₆ 가스에서 탄성 및 비탄성 산란을 고려하여 E/N : 600[Td]에서 전자에너지 분포함수 $F(\epsilon)$ 를 몬테칼로

시뮬레이션법과 볼츠만 방정식법을 이용하여 나타낸 것이다.

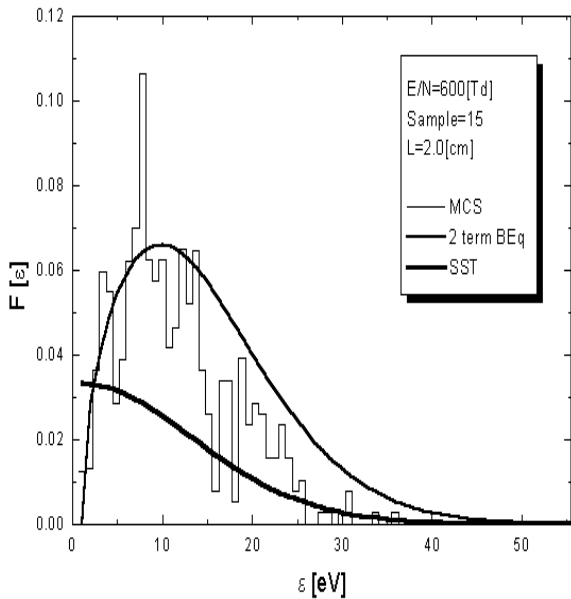


그림 4 SF₆ 가스 중에서의 전자에너지 분포함수
Fig. 4 electron energy distribution function in SF₆ gas

여기로 인하여 전자의 에너지를 잃어버리게 되면 불평형 영역이 크게 나타난다.

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

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

4.1.2 He 에너지 분포함수

그림 5는 He 가스에서 탄성 및 비탄성 산란을 고려하여 $E/N : 70$ [Td]에서 전자에너지 분포함수 $F(\epsilon)$ 를 몬테칼로 시뮬레이션법과 볼츠만 방정식법을 이용하여 나타낸 것이다.

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

4.1.3 SF₆-He 에너지 분포함수

그림 6은 SF₆-He(50:50) 가스에서 탄성 및 비탄성 산란을 고려하여 $E/N : 400$ [Td]에서 전자에너지 분포함수 $F(\epsilon)$ 를 몬테칼로 시뮬레이션법과 볼츠만 방정식법을 이용하여 나타낸 것이다.

여기에서도 $F(\epsilon)$ 의 값은 초기에너지에서는 증가하고 그 이상의 전자에너지에서는 감소하는 경향이 나타났다. 이것은

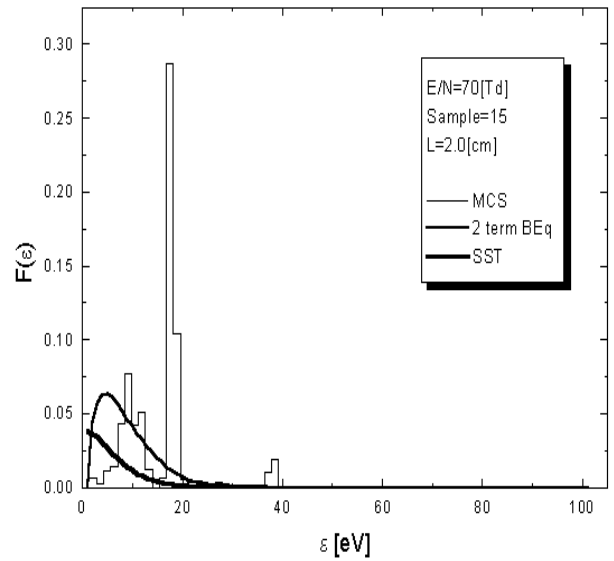


그림 5 He 가스 중에서의 전자에너지 분포함수
Fig. 5 electron energy distribution function in He gas

전자의 에너지가 증가함에 따라 $F(\epsilon)$ 은 감소하여 43[eV] 이상에서는 몬테칼로 시뮬레이션 값과 볼츠만 값이 일치되고 있다

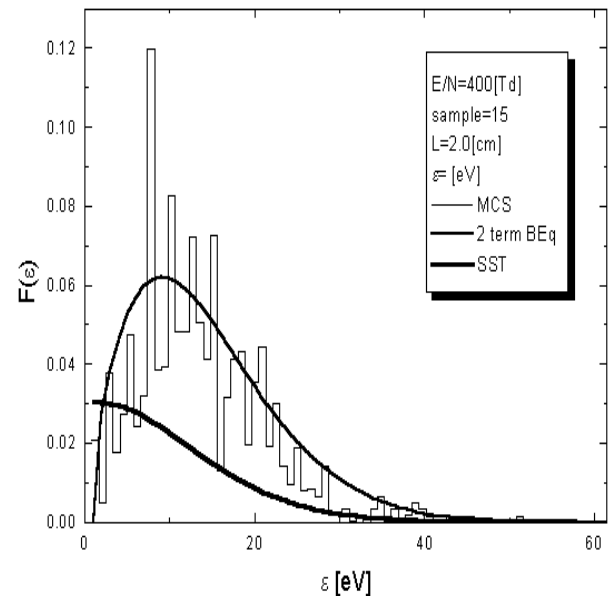


그림 6 SF₆-He 가스 중에서의 전자에너지 분포함수
Fig. 6 electron energy distribution function in SF₆-He

5. 결 론

SF₆-He가스의 전자충돌단면적을 이용하여 $0.1 \leq (E/N) \leq 700$ 범위에서 전자군의 파라미터 특성을 전자산란의 비평형 상태에서 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 SF₆가스에서는 이러한 구분이 명확하게 나타나지 않았는데 이는 부차특성이 강한 가스 고유의 성질 때문이다.
2. 가스의 종·횡방향 특성에너지는 잠시 구배가 낮아지는 경향이 있는데 이는 전자충돌에 의한 전리과정으로 전자가 중성분자와의 탄성충돌에 의해 자신의 운동에너지를 잃어버리기 때문이다.
3. SF₆-He 혼합가스는 상당히 순수 SF₆ 가스와 비슷한 결과를 가지는 것으로 나타나 그 동안 고가로 사용하던 순수 SF₆ 가스에 여러 희가스의 첨가로 특성 및 경제성을 개선할 수 있을 것이다.
4. 현재 사용되고 있는 25.9kV G.C.B에 들어가는 순수 SF₆가스를 대체하는 새로운 절연기체 개발에 MCS프로그램과 볼츠만 법을 이용한다면 많은 성과가 있을 것으로 기대된다.
5. SF₆-He혼합기체의 전자수송특성 파악으로 반도체의 박막 공정, 에칭 및 Plasma CVD의 활용에 기여할 것으로 판단된다.
6. SF₆-He혼합기체의 전자에너지 분포함수는 고가인 SF₆ 가스에 저가인 He가스를 50:50으로 혼합한 혼합기체의 특성이 SF₆ 순수가스의 특성과 비슷한 결과를 나타냄으로서 경제적인 타당성을 입증하였다.

감사의 글

본 논문은 인천대학교 2013년도 자체연구비 지원에 의하여 연구되었습니다. 대학당국에 감사드립니다.

참 고 문 헌

- [1] 電氣學會 技術報告, “氣體放電 シミュレーション 技法”, 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. E. Kline, and W. E. Bies. “Measurements of swarm parameters and derived electron collision cross sections in methane”, J. Appl. Phys. 65. 3311-3323. 1989.
- [4] Y Ohmori, K Kitamori, H Tagashira “Boltzmann equation analysis of electron swarm behavior in Methane” The Institute of Physics. 437-455 1986
- [5] 菅野卓雄, “半導體 プラズ마 プロセス技術”, 産業圖書, pp. 38-50, 1993
- [6] “몬테칼로법 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
- [10] A. Gilardini, “Low Energy Electron Collisions in Gases” John Wiley and Sons. Inc. pp. 127-162. 1972
- [11] S. R. Hunter, J. G. Carter. “Electron transport measurements in methane using an improved pulsed Townsend technique” J. Appl. Phys. 60. 1986
- [12] M. G. Curtis, Isobel C. Walker and K. J. Mathieson, “Electron Swarm Characteristic Energies(Dr/μ) in Tetrafluoro methane(CF₄) at Low E/N”, IOP Publishing Ltd, pp. 1271-1274, 1988.
- [13] L. E. Kline, and W. E. Bies. “Measurements of swarm parameters and derived electron collision cross sections in methane”, J. Appl. Phys. 65. 3311-3323. 1989.
- [14] S. N. Kim, “Distribution Function and Drift Velocities in Mixtures of SF₆ and Ar” 59P-2-3, KIEE, pp. 146-150, 2010
- [15] S. N. Kim, “Ionization and Attachment Coefficients in CF₄, CH₄, Ar Mixtures Gas” 61P-1-4, KIEE, pp. 13-18, 2012
- [16] S. N. Kim, “Electron Energy Distribution function in CH₄ gas by MCS-BE” 62P-1-4, KIEE, pp. 18-22, 2013

저 자 소 개



김 상 남 (金 相 南)

1951년 3월 21일생. 1978년 숭실대학교 전기공학과 졸업. 1980년 숭실대학교 대학원 졸업(석사), 2001년 동국대학교 대학원 졸업(공학), 1978~2009 시립 인천전문대학 전기과 교수, 2010~현재 국립 인천대학교 전기공학과 교수
 Tel : 032-835-8439
 Fax : 032-835-4922
 E-mail : sn7332@incheon.ac.kr
 sn7332@hanmail.net