

2항근사 볼츠만 방정식을 이용한 Xe분자가스의 전자수송계수의 해석

The study of electron transport coefficients in pure Xe by 2-term approximation of the Boltzmann equation

마 수영*, 전 병훈*, 김 송강**

(Su-Young Ma*, Byung-Hoon Jeon* and Song-Gang Kim**)

Abstract

The electron transport coefficients, the electron drift velocity W , the longitudinal diffusion coefficient ND_L and D_L/μ , in pure Xe were calculated over the wide E/N range from 0.01 to 500 Td at 1 Torr by two-term approximation of the Boltzmann equation for determination of electron collision cross sections set and for quantitative characteristic analysis of Xe molecular gas.

Key Words : Electron drift velocity, Longitudinal diffusion coefficient, Electron transport coefficient, Xe molecular gas, Two-term approximation of the Boltzmann equation

1. 서론

플라즈마 현상을 정량적으로 이해하기 위해, 또는 어떠한 목적에 맞는 플라즈마를 만들기 위해서는 이용하고자 하는 기체의 종류나 혼합비, 기체 압력 등의 평가가 필요하며, 계산기에 의한 시뮬레이션은 이러한 평가를 위한 유력한 수단이 되고 있다. 그리고 시뮬레이션이 정량적으로 있기 위해서는 플라즈마를 구성하는 기체와 전자와의 상호작용에 관한 지식, 특히 전자충돌단면적의 정확한 데이터와 개개의 기체분자가 가지고 있는 전자수송계수의 해석은 필

수 불가결한 상태이다.

가스분자가 가지고 있는 전자충돌단면적의 정확한 데이터를 구하는 방법에는 전자빔 방법(Electron Beam Method)과 전자군 방법(Electron Swarm Method)이 소개되고 있다. 여기서 본 연구에 이용되고 있는 전자군 방법을 간략히 소개하면, 낮은 에너지 범위에 존재하는 목적 기체분자의 정확한 여기단면적을 결정하는 방법으로서 회가스와의 혼합가스와 순수가스상태에서의 전자이동속도, 종축확산계수, 전리계수, 부착계수 등의 전자수송계수를 측정하고, 이들 계수들을 볼츠만 방정식 해법이나 몬테칼로 시뮬레이션 기법을 이용한 계산결과와의 비교를 통하여 목적으로 삼고 있는 기체분자의 정확한 전자충돌단면적을 결정하는 것이다. 그리고 전자수송계수의 시뮬레이션 기법을 통한 분자가스의 물성적 해석의 초기 연구는 Itoh[1], Musha[2], Thomas[3]에 의해 연

* 중부대학교 컴퓨터응용설계학과
(충남 금산군 추부면 마전리 산2-25)

Fax : 041-750-6655

E-mail : bhjeon@joongbu.ac.kr

** 중부대학교 정보통신공학과

구되었는데 이것은 방전 공간 내에서 나타나는 전체의 전자를 추적하여 전자이동속도 등 전자수송계수의 동향을 조사하여 이들 전자의 물리량을 가상적으로 샘플링(Sampling)하고 그들 하전입자의 운동을 전자계산기로 계산하여 그 특성을 확률적으로 결정하여 해석하였다.

본 연구에 이용되고 있는 Xe분자가스는 PDP (Plasma Display Panel)의 형광 방전 램프에 주로 사용되고 있는 Hg분자가스의 단점을 보완하기 위해 사용되고 있다.[4] 본 논문에서는 전자군 방법을 이용하여 Xe분자가스의 정확한 전자충돌단면적의 결정과 순수 Xe분자가스에서의 전자수송계수의 정확한 물성적 해석을 위하여, 0.01~500 Td에 이르는 광범위한 E/N 범위에서 전자이동속도와 종축확산계수를 2항근사 볼츠만 방정식을 이용하여 계산하고 해석하고 있다.

2. 2항근사 볼츠만방정식 해석

기체 중에서 하전입자군의 수송계수를 측정하는 방법에는 2항근사와 다항근사 볼츠만 방정식 해법과 몬테칼로 시뮬레이션 기법과 같이 3가지 방법이 있다.

그 중에서도 볼츠만 방정식은 열평형 상태에서가 아닌 다입자계(多粒子系) 운동의 기술에 이용해 이것을 전자군의 거동 해석에 이용하고 있다. 볼츠만 방정식 해석에서는 전자의 거동을 분포함수라고 하는 거시적인 형태로 표시하고, 이 분포함수에서 전자수송계수를 산출한다. 이 방법에서는 충돌의 확률적인 성질을 기초로 하여 전자군 발달(發達)의 통계적 변동은 나타나지 않으며, 통계시간은 비교적 짧다. 그러나, 미적분방정식으로 된 볼츠만 방정식은 일반적으로 그 해를 구하는 것이 어렵고, 종래 많이 사용되어왔다. 전자의 속도분포함수를 Legendre 급수로 전개하고, 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 에너지분포를 구할 때 샘플 수는 차츰 적어져 통계적 변동을 다수 포함한 결과로 되기 쉽다. 전자 수를 많이 택하면 전자계산기

의 계산시간도 그에 비례하여 증가하므로 이것을 보완하기 위하여 순수한 관측 법에서의 차이를 지정하는 영역에서 어느 정도의 폭을 갖게 한다. TOF 샘플링법으로 방전공간의 전자이동속도, 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 $\langle Z(t_k) \rangle$ 는 다음과 같이 식 2.1로 나타낸다.

$$\langle Z(t_k) \rangle = \frac{1}{M_k} \sum_{j=1}^{M_k} Z_j(t_k) \quad 2.1$$

전자군의 중심이동속도 W 는 다음과 같다.

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

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

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

한편, 횡방향확산계수 D_T 는 전계와 직각방향의 위치분산으로 다음과 같이 표현하고, 시간에 대한 기울기로 구한다.

$$\frac{1}{2} \frac{1}{2!M_k} \sum_{j=1}^{M_k} (r_j^2) \quad 2.4$$

여기서 r_{j_i} 는 Z_j 의 직각방향 성분이다. 평균에너지($\bar{\epsilon}$)는 i 번째의 에너지를 ϵ_i 라고 하면

$$\langle \bar{\epsilon} \rangle = \frac{1}{M_k} \sum_{i=1}^{M_k} \epsilon_i \quad 2.5$$

으로 나타낸다.

전자수가 보존되지 않는 경우 즉 전리, 부착이 일어나는 경우에 대해서도 샘플 수 M_k, M_{k+1} 등이 변화하는 상태이므로 동일한 방법으로 구할 수 있다.

3. 전자 충돌 단면적

본 논문에서 사용한 Xe분자가스의 전자충돌단면적을 그림 1에 나타내었는데 이들 충돌단면적은 전자의 특성을 파악하는 기초 자료로서 상당히 중요하다. 특히 이 분자가스의 특징은 그림에서 보여지는 바와 같이 다수의 여기단면적으로 구성되어있고, 0.

4~0.8 eV 범위에 희가스의 대표적인 Ar[5]에서 보여 주었던 운동량변환단면적의 Ramsauer Townsend Minimum(RTM)을 가지고 있다.

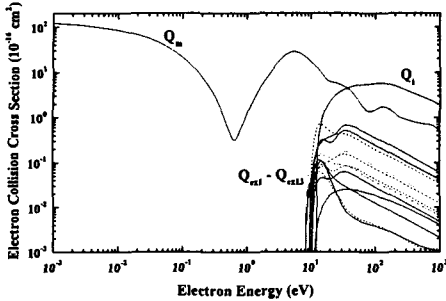


그림 1. Xe분자가스의 전자충돌단면적
Fig. 1 The electron collision cross sections set for Xe molecular gas

4. 시뮬레이션 결과 및 고찰

4.1 전자기동속도

그림 2의 전자기동속도는 0.01~300 Td에 이르는 광범위한 E/N범위에서 2항근사 볼츠만 방정식을 이용한 순수 Xe분자가스의 계산결과를 보여주고 있다.

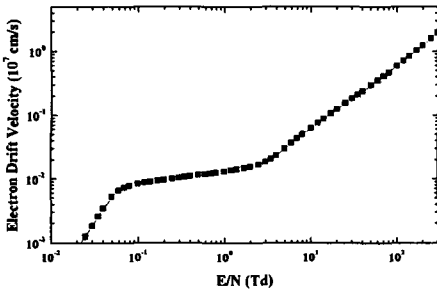


그림 2. 순수 Xe분자가스의 전자기동속도
Fig. 2. The electron drift velocity in pure Xe gas

본 그림에서는 나타내 보이고 있지 않지만 순수 Xe분자가스의 이동속도의 계산결과는 순수 Ar가스에서 보여지는 현상과 유사한 점이 있다. 그것은 RTM의 운동량변환단면적을 가지고 있는 일반가스

에서 보여지는 E/N증가에 따라 전자기동속도가 감소하였다가 증가하는 부구배 특성(Negative Differential Conductivity, NDC)[6]이 보여지지 않는 것이다. 이것은 다시 말해 낮은 에너지 범위, 특히 RTM이 보여지는 1 eV이하에서는 (진동)여기단면적이 존재하지 않음을 시사해주고 있다.

아직 다른 저자의 실험결과와의 비교가 없어 타당성은 입증되지 못하고 있는 실정이며, 앞으로 추진해 나가야 할 과제이다.

4.2 종축확산계수

그림 3과 4는 종방향확산계수 D_L 을 기체분자수밀도와 전자기동도의 곱과 비의 관계인 ND_L 과 D_L/μ 를 E/N의 함수로 나타낸 것이다.

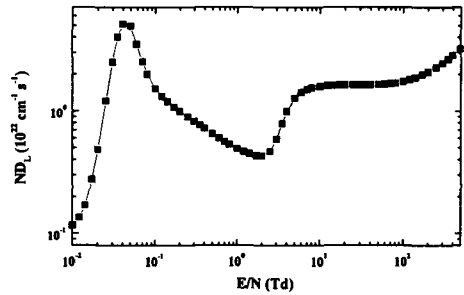


그림 3. 순수 Xe분자가스에서 종방향확산계수(D_L)와 기체분자수밀도(N)와의 곱

Fig. 3. ND_L in pure Xe

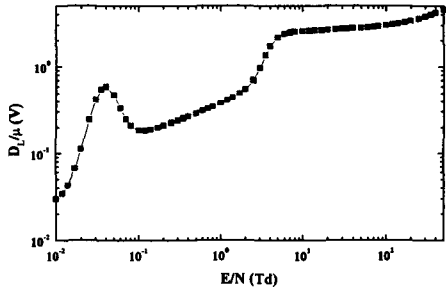


그림 4. 순수 Xe분자가스에서 종방향특성에너지
Fig. 4. D_L/μ in pure Xe

순수 Xe분자가스에서 ND_L 과 D_L/μ 의 계산결과

는 전자이동속도의 결과에서 보여주는 것과는 다르게 $E/N=0.06$ Td와 약 2.5 Td부근에서 운동량변환단면적과 여기단면적간의 충돌에 의한 영향을 보여주고 있다. 특히 전자이동속도의 결과에서는 보여지고 있지 않은 NDC 현상이 보여주고 있어 다른 저자의 실험결과나 계산결과의 비교를 통한 정확한 해석이 요구되고 있다.

5. 결론

순수 Xe분자가스의 전자수송계수를 2항근사 볼츠만방정식 해법을 이용하여 $0.01 \text{ Td} \leq E/N \leq 300 \text{ Td}$ 범위에서 계산하였다. 그 결과 계산된 전자이동속도에서는 E/N 증가와 더불어 그 값들이 완만한 증가를 보여주고 있어 낮은 에너지 범위에서 (진동)여기 단면적이 존재하지 않음을 확인시켜주었으며, ND_L 과 D_L/μ 의 계산결과에서는 운동량변환단면적의 RTM의 존재와 높은 에너지 범위에서의 복잡한, 달리 해석하여 수많은 상태의 여기단면적의 존재를 보여주고 있다.

정확한 Xe분자가스의 정량적 해석과 본 연구에서 사용된 초기 단면적 그리고 이용된 2항근사 볼츠만방정식의 타당성을 해결하기 위해서는 앞으로 다른 저자에 의한 실험결과나 계산결과의 비교가 요구되어지는 바이다.

참고문헌

- [1] H. Itoh, Y. Miura, N. Ikuta, Y. Nakao and H. Tagashira, "Electron swarm development in SF₆ : 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] K. Takahashi and K. Tachibana, "Determination of electron impact ionization and excitation coefficients in He-Xe gas mixtures.", T. IEE Japan, Vol. 111-A, No. 3, pp. 182-191, 1991
- [5] Y. Nakamura and M. Kurachi, "Electron Transport Parameters in Argon and its momentum transfer cross section" J. Phys. D21, pp. 718-723,

1988.

- [6] 하 성철, 전 병훈, "볼츠만 방정식과 몬테칼로법에 의한 SiH₄-Ar 혼합가스의 전자수송계수에 관한 연구", 한국전기전자재료학회지 14권, 2호 pp. 169-174, 2001