

다항근사 볼츠만 방정식의 타당성 검토를 위한 가스의 전자수송계수 비교

송병두, 하성철, 전병훈*

동국대학교, 중부대학교*

The comparison of electron transport coefficients of gases for analysis of multi-term approximation of the Boltzmann equation.

Byoung-Doo Song, Sung-Chul Ha, and Byoung-Hoon Jeon*

Dongguk Univ., Joongbu Univ.*

Abstract

This paper describes the information for the difference between two-term and multi-term approximation of the Boltzmann. In previous paper, we calculated the electron transport coefficients in pure Oxygen and Argon gases by using two-term approximation of Boltzmann equation. Therefore, in this paper, we calculated the electron transport coefficients(W and $N \cdot D_L$) in pure Oxygen and Argon gases for range of E/N values from 0.01~500[Td] at the temperature was 300[K] and pressure was 1[Torr] by using multi-term approximation of the Boltzmann equation by Robson and Ness. The results of two-term and multi-term approximation of the Boltzmann equation has been compared with the experimental data for a range of E/N .

Key Words : The two-term approximation of the Boltzmann equation, The multi-term approximation of the Boltzmann equation, W , $N \cdot D_L$

1. 서 론

플라즈마 현상을 정량적으로 해석하기 위하여 사용되는 시뮬레이션 중 보편적으로 전자수송계수의 산출에 소요되는 시간이 비교적 짧은 2항 근사 볼츠만 방정식을 사용하여 왔다. 따라서 탄성충돌 단면적보다 비탄성충돌 단면적이 작은 경우에 한하여 2항근사 기법에 의한 전자수송계수는 거시적인 오차를 가지고 있으나 무시할 정도로 작아 수치계산을 통해 얻어지는 결과는 신뢰할 정도의 오차를 포함하지만 전자충돌단면적의 특성에 따라 무시하기 어려운 경우도 발생할 수 있다. 전자군 수치계산에 사용되는 볼츠만 방정식 기법으로는 2항 근사와 다항 근사 두 가지 기법이 있으며, 이 두 가지 기법 중 지금까지 계산시간이 비교적 짧고 간

단한 2항 근사 기법 사용하여 이 방법에 의해 Ar과 O₂ 가스의 전자수송계수를 계산하였다.[1][2] 그러나 한 분자가스의 단면적의 특성에 따라 낮은 에너지 범위에서 탄성충돌단면적보다 큰 비탄성충돌단면적을 가지고 있거나 진동여기단면적을 가지고 있는 분자가스에서는 2항 근사 볼츠만 기법의 이용은 정확한 결과를 얻어내는데 한계가 있다. 본 논문에서는 Robson and Ness[3]에 의해 연구된 다항 근사 볼츠만 방정식과 2항 근사 볼츠만 방정식 법을 이용하여 $E/N=0.01 \sim 500$ [Td] 범위, 압력 =1[Torr] 온도=300[K]에서 Ar 및 O₂의 수송계수를 시뮬레이션하여 산출하고 그 결과를 각각 Y. Nakamura and M Kurachi[1]의 Ar 실험결과 및 Jeon B. H. and Y. Nakamura[2]의 O₂ 실험결과와 비교 검토하였다.

2. 다항근사 볼츠만 방정식

기체중의 방전현상은 상호충돌을 되풀이하는 하전입자에 의하여 발생되며, 이들 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. 전자군이 임의의 위치와 속도 및 시간의 함수인 전자수 밀도는 위치 변화에 따른 밀도의 변화와 전계에 의한 속도의 변화에 따른 밀도의 변화, 그리고 충돌로 나타나는 속도의 변화에 의한 밀도의 변화로 나타낼 수 있고, 이것을 식으로 표현한 것이 볼츠만 방정식(Boltzmann equation)이다.[4] 본 논문에서 TOF 샘플링 방법에 의해 가스들의 전자수송계수를 산출하는데 이용한 2항 근사와 다항 근사 볼츠만 방정식은 열평형 상태에서가 아닌 다입자계 운동의 기술에 이용해 이것을 전자군의 거동해석에 이용하고 있다. 볼츠만 방정식에서는 전자의 거동을 분포함수라는 거시적인 형태로 표시하고, 이 분포함수에서 전자수송계수를 산출한다. 본 논문에서 사용한 다항 근사 볼츠만 방정식은 Robson and Ness[3]에 의해 제시된 해석법을 이용한 것이며 그 내용을 요약하면 다음과 같다.

탄성충돌에서는 전자의 질량이 원자의 질량에 비하여 매우 적으므로 전자는 운동에너지를 잃지 않고 산란되는 것으로 간주하여, 단지 탄성충돌만이 일어나는 속도공간 내에서의 전자분포함수는 거의 등방성으로 작용하므로 2항 근사는 구면조화로 표현할 필요가 있다. 이에 Kumar et al. 은 구면조화에서 분포함수의 표현을 다음과 같이 나타낸다.

$$f(v, r, t) = n(r, t) \sum_{l=0}^{l_{\max}} \sum_{m=-l}^l f_m^{(l)}(v) Y_m^{(l)}(\theta, \psi)$$

여기서 $f_m^{(l)}(v)$ 는 텐서(tensor)계수, $Y_m^{(l)}(\theta, \psi)$ 는 구면조화이며, $l_{\max} = 1$ 일 때, 2항 근사로 주어진다. 따라서 $l_{\max} > 1$ 일 때를 다항 근사라 하며, 이 다항 근사 기법은 Robson and Ness에 의해 급진적으로 발전되어 전자속도분포함수를 Legendre와 Sonine 급수로 전개하였고, 전자수송계수들은 다양한 Legendre 다항식 l 과 Sonine 다항식 ν 에 의해 구하고 있다.

3. 전자 충돌 단면적

3.1 Ar 가스의 전자충돌 단면적

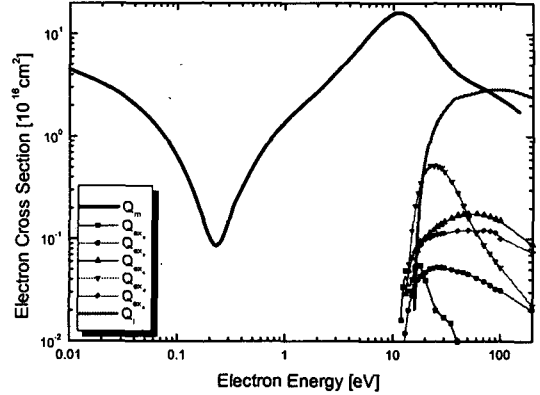


그림 1 아르곤 가스의 전자충돌단면적

Fig. 1 The electron collision cross section set for Argon gas

본 논문에서 이용된 Ar 가스의 전자충돌 그림 1에 나타내었다. Ar의 전자충돌 단면적은 운동량 변환 단면적(Q_m), 여기 단면적(Q_{ex}), 전리 단면적(Q_i) 등으로 구성되어있다. 가스의 충돌단면적은 전자의 특성을 파악하는 기초자료로서 상당히 중요하며, 각각의 단면적의 구조적 특성은 본 논문에서 이용한 2항근사와 다항근사 볼츠만 방정식의 적용에 있어서 어떤 관련이 있는지 알 수 있다.

Ar 가스의 특징은 그림에서 나타난 바와 같이 다수의 여기단면적으로 구성되어 있고, 저에너지 영역 0.1~0.3[eV] 범위에 운동량 변환단면적의 Ramsauer Townsend Minimum(RTM)을 갖는 K. L. Bell, N. S. Scott[7]의 계산값을 이용하였다.

3.2 O₂ 가스의 전자충돌 단면적

그림 2는 O₂ 가스의 전자충돌단면적으로 Ar과 같이 운동량 변환단면적의 RTM을 가지고 있지는 않지만, E/N=0.2~2[Td] 사이에 진동여기단면적을 가지는 것이 특징이며, 전자충돌단면적 중 작지만 전자부착단면적 높은 에너지 영역에 존재하고, Threshold 에너지는 4.7[eV]의 값을 갖는다.[5] 여러 단면적 중에서 절연기체에 관련된 것으로 전리와 부착단면적이, 에칭에 관련된 것으로는 여기와 해리단면적이 충돌단면적 중에서 중요하다.

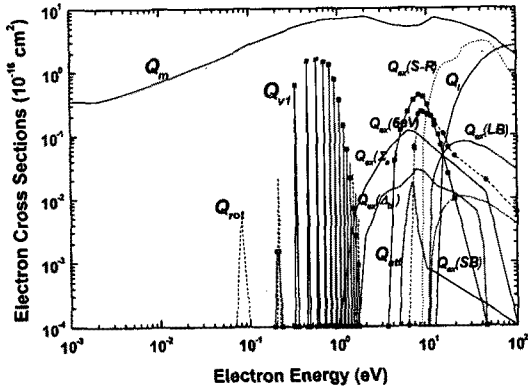


그림 2 산소 가스의 전자충돌단면적
 Fig. 2 The electron collision cross section set for Oxygen gas

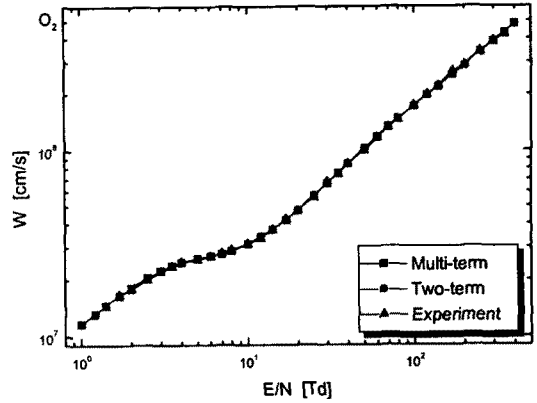


그림 4 산소 가스의 전자이동속도
 Fig. 4 The electron drift velocities in Oxygen gas

4. 시뮬레이션 결과 및 고찰

4.1 가스의 전자이동속도

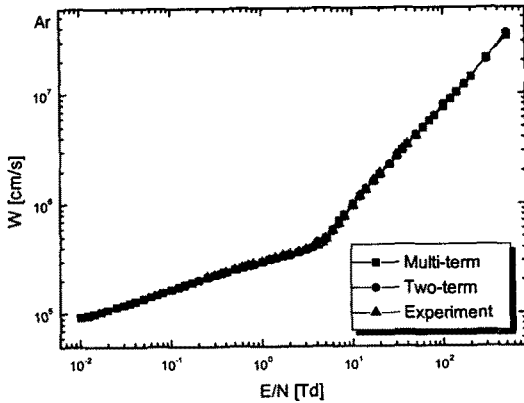


그림 3 아르곤 가스의 전자이동속도
 Fig. 3 The electron drift velocities in Argon gas

그림 3의 전자이동속도는 0.01~500[Td]에 이르는 광범위한 E/N 범위에서 2항 근사와 다항 근사 볼츠만 방정식에 의하여 계산한 결과를 Y. Nakamura and M Kurachi[1]의 실험결과와 비교한 것이다. 2항 근사와 다항 근사 볼츠만 방정식법에 의한 두 결과와 실험치 모두 잘 일치하는 것으로 나타났다. 또한 Ar 가스의 이동속도 증가추이가 낮은 에너지 영역에서 낮게 나타나는 것은 운동량 단면적에서 나타난 Ramsauer Townsend Minimum(RTM) 영역에서 다른 단면적의 영향 없이 전적으로 운동량 단면적에 의해 좌우된다.

그림 4의 전자이동속도는 E/N=0.1~500[Td] 범위에서 2항 근사와 다항 근사 볼츠만 방정식에 의하여 계산한 결과를 Jeon B. H., Nakamura Y.[2]의 실험결과와 비교한 것이다. 2항 근사와 다항 근사 볼츠만 방정식법에 의한 두 결과와 실험치 모두 잘 일치하는 것으로 나타났다. 이동속도의 증가 추이가 낮은 에너지 영역에서 낮게 나타나는 것은 Ar에서 처럼 운동량 단면적에서 나타난 RTM의 영향을 받은 것과는 달리 비탄성충돌단면적인 회전여기단면적 및 진동여기단면적의 영향을 받은 것으로 보여진다.

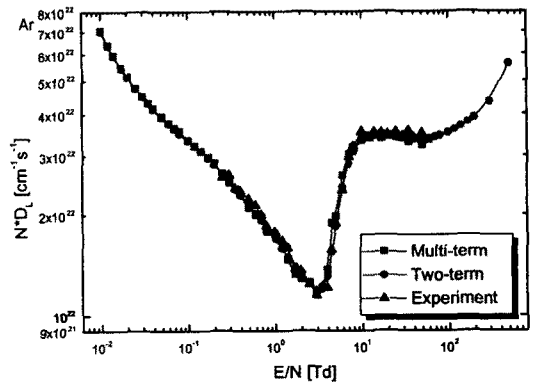


그림 5 아르곤 가스에서의 종방향확산계수(DL)와 기체분자수밀도(N)와의 곱
 Fig. 5 The product of gas number density(N) and longitudinal diffusion coefficients(DL) in Argon gas

4.2 가스의 종방향 확산계수

그림 5는 Ar의 종방향 확산계수 D_L 에 기체 분자 수 밀도를 곱한 것을 E/N 의 함수로 나타낸 것이다. 그림에 나타난 바와 같이 계속하여 감소하다 3[Td] 부근을 정점으로 증가하기 시작한 것은 Ar 단면적에서 나타난 바와 같이 운동량 변환 단면적의 RTM에 의하여 부구배(Negative Differential Conductivity, NDC)가 나타난다.

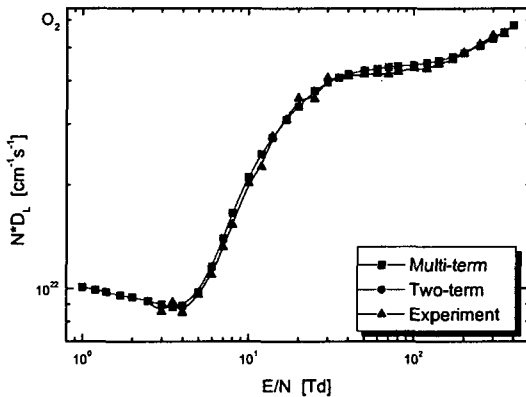


그림 6 산소 가스에서의 종방향 확산계수(D_L)와 기체분자수밀도(N)와의 곱

Fig. 6 The product of gas number density(N) and longitudinal diffusion coefficients(D_L) in Oxygen gas

그림 6은 O_2 의 종방향 확산계수 D_L 에 기체 분자 수 밀도를 곱한 것을 E/N 의 함수로 나타낸 것이다.

4. 결론

플라즈마 현상을 정량적으로 해석하기 위하여 사용되는 시뮬레이션 중 보편적으로 전자수송계수의 산출에 소요되는 시간이 비교적 짧은 2항 근사 볼츠만 방정식을 사용하여 왔다. 따라서 탄성충돌 단면적보다 비탄성충돌 단면적이 작은 경우 2항 근사 기법에 의한 전자수송계수는 거시적인 오차를 가지고 있으나 무시할 정도로 작아 수송계수의 특성 해석이나 단면적의 세트의 결정이 가능했다.

Ar가스와 같이 낮은 에너지 범위에 탄성충돌 단면적이 RTM의 유·무와는 상관없이 단독으로 존재할 경우, 2항 근사 기법 및 다항 근사 기법을 이용하여 산출한 전자수송계수의 결과는 차이가 거의

나타나지 않아 단면적 세트의 결정이 가능하며, O_2 가스와 같은 낮은 에너지 범위에 커다란 비탄성충돌 단면적이 존재하더라도 그 단면적이 탄성충돌 단면적보다 작은 값으로 존재할 때 2항 근사 기법에 의한 전자수송계수는 다항 근사 기법과 비교하여 오차가 무시할 정도로 작아 2항 근사 만으로도 타당한 결과를 얻을 수 있었다. 하지만 비탄성충돌 단면적이 탄성충돌 단면적보다 큰 가스에서는 어떠한 차이를 나타내는지 앞으로 연구해야 할 필요가 있으며, 나아가 가스의 전자충돌 단면적이 가지고 있는 구조적인 특성에 따라 어떠한 시뮬레이션 기법을 적용하는 것이 적절한가에 대한 판단기준이 요구되어진다.

참고 문헌

- [1] Y. Nakamura and M. Kurachi, "Electron transport parameter in argon and its momentum transfer cross section", J. Phys. D: Appl/ Phys. 21, pp. 718-723, 1988.
- [2] Jeon B. H., Nakamura Y. "Measurement of drift velocity and longitudinal coefficients of electrons in Pure Oxygen and in Oxygen-Argon mixture" J. Phys. D. Vol 31. pp 214 5~2150, 1998.
- [3] R. E. Robson and K. F. Ness, "Velocity distribution and transport coefficients of electron swarms in gases:...", Phys. Rev. A33, pp. 2068-2077, 1986.
- [4] 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, 1974.
- [5] 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.