

볼츠만 다항근사 방정식을 이용한 Xe 가스의 전자수송계수 해석

진병훈, 하성철, 송병두*

중부대학교, 동국대학교*

The analysis of electron transport coefficients in Xenon gas by multi-term approximation of the Boltzmann equation

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

Joongbu Univ., Dongguk Univ.*

Abstract

This paper describes the information for quantitative simulation of weakly ionized plasma. In previous paper, we calculated the electron transport coefficients in pure Xenon gas by using two-term approximation of Boltzmann equation. Therefore, in this paper, we calculated the electron transport coefficients(W , $N \cdot D_L$ and D_L/μ) in pure Xenon gas 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 by L. S. Frost and A. V. Phelps 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 , $N \cdot D_L$, D_L/μ

1. 서론

전자군 수치계산에 사용되는 볼츠만 방정식 기법에는 2항 근사와 다항 근사 두 가지 기법이 있다. 이 두 가지 기법 중 2항 근사 기법은 계산시간이 비교적 짧고 간단하여 가장 보편적으로 사용하는 방법으로 이 방법에 의해 Xe 가스의 전자수송계수를 계산하였다.[1] 그러나 한 분자가스의 단면적의 특성에 따라 낮은 에너지 범위에서 탄성충돌 단면적보다 큰 비탄성충돌 단면적을 가지고 있거나 진동여기 단면적을 가지고 있는 분자가스에서는 2항 근사 볼츠만 기법의 이용은 정확한 결과를 얻어내는데 한계가 있다. 전자수송계수의 시뮬레이션 기법을 통한 분자가스의 물성적 해석의 초기연구

는 Itoh, Musha[2]에 의해 연구되었는데 이것은 방전 공간내에서 나타나는 전체 전자를 추적하여 전자이동속도 등 전자수송계수의 동향을 조사하여 이들 전자의 물리량을 가상적으로 샘플링(Sampling)하고 그들 하전입자의 운동을 전자계산기로 계산하여 그 특성을 확률적으로 결정하여 해석하였다.[3] 본 논문에서는 Robson and Ness[4]에 의해 연구된 다항 근사 볼츠만 방정식을 이용하여 $E/N = 0.01 \sim 500$ [Td] 범위, 압력 = 1 [Torr] 온도 = 300 [K] 에서 크세논의 수송계수 산출을 위하여 볼츠만 방정식의 2항 근사법과 다항 근사법에 의하여 시뮬레이션하고 그 결과를 L. S. Frost and A. V. Phelps[5]의 결과와 비교 검토하였다.

2. 볼츠만 방정식 법

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.[3] 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[4]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.

$$f(v, r, t) = n(r, t) \sum_{l=0}^{l_{\max}} \sum_{m=-l}^l f_m^l(v) Y_m^{l0}(\theta, \psi)$$

여기서 $f_m^l(v)$ 는 텐서(tensor)계수, $Y_m^{l0}(\theta, \psi)$ 는 구면조화이며, $l_{\max} = 1$ 일 때, 2항 근사로 주어진다.

따라서 $l_{\max} > 2$ 일 때를 다항 근사라 하며, 이 다항 근사 기법은 Robson and Ness에 의해 급진적으로 발전되었다. 그들은 전자속도분포함수를 Legendre와 Sonine 급수로 전개하였고, 전자수송계수들은 다양한 Legendre 다항식 l 과 Sonine 다

항식 v 에 의해 다음과 같은 수밀도에서의 연속식으로 부터 구하고 있다.

$$\partial n = -\alpha n - W \partial_z n + D_T (\partial_x^2 + \partial_y^2) n + D_L \partial_z^2 n$$

여기서 α 는 부착계수, W 는 전자기동속도, D_L , D_T 는 종·횡축 확산계수를 나타내고 있고, 각각의 전자수송계수는 다음과 같이 나타내고 있다.

<부착계수>

$$\alpha = 4\pi \int_0^\infty f_R^{(0)} [K_{00} | 00] v^2 dv$$

<전자이동속도>

$$W = i \left[\frac{4\pi}{3} \right] \int_0^\infty v^3 K_{10} | 00 \rangle dv - i\sqrt{4\pi} \int_0^\infty v^2 f_R [K_{00} | 11] dv$$

<종축확산계수>

$$D_L = - \left[\frac{4\pi}{3} \right] \left[\int_0^\infty v^3 K_{10} | 11 \rangle dv + \int_0^\infty f_R^2 (K_{00} | 20) - \sqrt{2} (K_{00} | 22) v^2 dv \right]$$

<횡축확산계수>

$$D_T = - \left[\frac{4\pi}{3} \right] \left[\int_0^\infty v^3 K_{11} | 11 \rangle dv + \int_0^\infty f_R^2 (K_{00} | 20) + \frac{1}{\sqrt{2}} (K_{00} | 22) v^2 dv \right]$$

3. 전자 충돌 단면적

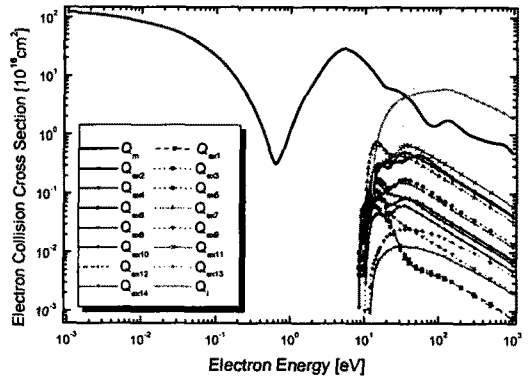


그림 1 Xe 가스의 전자충돌단면적

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

본 논문에서 사용한 Xe 가스의 전자충돌 단면적을 그림 1에 나타내었다. 충돌단면적은 전자의 특성을 파악하는 기초자료로서 상당히 중요하다. 특

히 Xe 가스의 특징은 그림에서 나타난 바와 같이 다수의 여기단면적으로 구성되어 있고, 0.3~1.0[eV] 범위에 희가스의 대표적인 Ar에서도 나타났던 운동량 변환단면적의 Ramsauer Townsend Minimum(RTM)을 가지고 있다.

4. 시뮬레이션 결과 및 고찰

4.1 전자이동속도

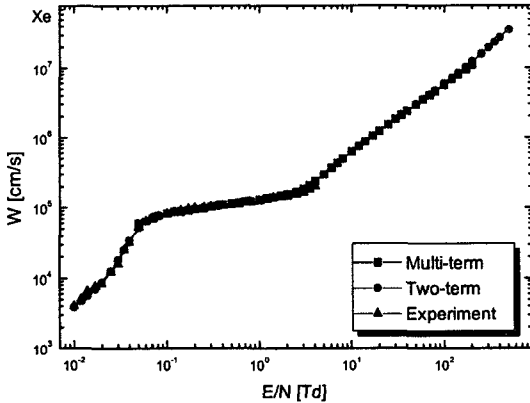


그림 2 Xe 가스의 전자이동속도

Fig. 2 The electron drift velocities in Xe gas

그림 2의 전자이동속도는 0.01~500[Td]에 이르는 광범위한 E/N 범위에서 2항 근사와 다항 근사 볼츠만 방정식에 의하여 계산한 결과를 L. S. Frost and A. V. Phelps[5]의 실험결과와 비교한 것이다. Xe 가스의 이동속도 증가추이가 0.08~30[Td] 사이에서 둔화되는 것은 운동량 단면적에서 나타난 Ramsauer Townsend Minimum(RTM) 영역에서 다른 단면적의 영향 없이 전적으로 운동량 단면적에 의해 좌우되는 것을 보여준다.

4.2 종축확산계수

그림 3은 종방향 확산계수 D_L 에 기체 분자수 밀도를 곱한 것을 E/N의 함수로 나타낸 것이다. 그림에 나타난 바와 같이 증가하던 값이 0.05[Td]에서 감소하기 시작한 것은 Xe 단면적에서 나타난 바와 같이 운동량 변환 단면적의 Ramsauer Townsend Minimum(RTM)에 의하여 부구배(Negative Differential Conductivity, NDC)가 나타나고 다시 증가하던 값이 여기단면적의 영향으로

10~100[Td] 사이에서 증가하지 않고 일정한 값을 유지하고 있다.

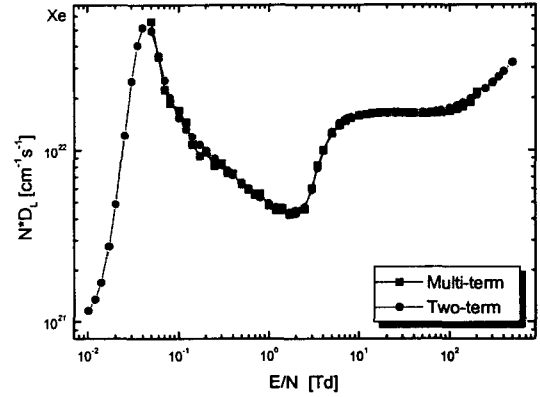


그림 3 Xe 가스에서의 종방향확산계수(D_L)와 기체분자수밀도(N)와의 곱

Fig. 3 The product of gas number density(N) and longitudinal diffusion coefficients(D_L) in Xe gas

4.3 종방향 특성에너지

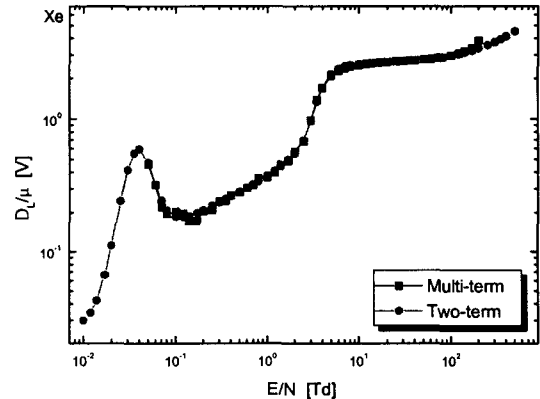


그림 4 Xe 가스의 종방향특성에너지

Fig. 4 The longitudinal characteristic energy in Xe gas

그림 4는 종방향확산계수 D_L 을 전자이동도로 나눈 비를 E/N의 함수로 나타낸 것이다. 종방향특성 에너지 또한 Xe가 가지는 RTM의 운동량 변환단면적의 영향을 받는 것을 알 수 있다.

5. 결 론

순수 Xe 분자 가스의 전자수송계수를 2항 근사와 다항 근사 볼츠만 방정식에 의하여 $0.01[\text{Td}] \leq E/N \leq 300[\text{Td}]$ 범위에서 계산하고 그 결과를 L. S. Frost and A. V. Phelps의 실험결과와 비교하였다. 그 결과 2항 근사와 다항 근사 볼츠만 방정식의 해법에 의해 계산된 전자기동속도는 차이가 없으며, 실험결과와도 일치하는 것을 확인할 수 있었다. 또한 전자기동속도는 E/N 증가와 더불어 그 값들이 완만한 증가를 보여주고 있어 낮은 에너지 범위에서 진동(여기) 단면적이 존재하지 않음을 확인할 수 있었다. 2항 근사와 다항 근사 볼츠만 방정식의 해법에 의해 계산된 $N \cdot D_L$ 과 D_L/μ 의 계산 결과에서도 서로 차이가 없었으며, 운동량 변화 단면적의 RTM의 영향으로 NDC가 나타나고 높은 에너지 영역에서는 여기 단면적의 영향을 받는 것을 확인하였다.

참고 문헌

- [1] 송병두, 하성철, 전병훈, "볼츠만 방정식을 이용한 Xe 가스의 전자기동속도 해석", 한국전기전자재료학회 춘계학술대회논문집, pp. 201-203, 2001.
- [2] H. Itoh, and T. Musha, "Monte Carlo Calculations of Motion in Helium", J. Phys. Soc. Japan, Vol. 15, No. 9, pp. 1675-1680, 1960.
- [3] 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.
- [4] R. E. Robson and K. F. Ness, "Velocity distribution and transport coefficients of electron swarms in gases:...", Phys. Rev. A33, pp. 2068-2077, 1986.
- [5] L. S. Frost and A. V. Phelps, "Momentum-transfer cross section for slow electrons in He, Ar, Kr and Xe", Phys. Rev. A1538-45, 1964.