

## 전자빔여기 XeF(C→A) 엑시머 레이저의 출력특성에 대한 시뮬레이션 해석

류한용 · 이주희

경희대학교 전자공학과

(1995년 4월 11일 받음)

전자빔여기 XeF(C→A) 엑시머 레이저의 상준위 B-와 C-상태에 대하여 충돌혼합 운동과정을 포함하는 모델을 컴퓨터 시뮬레이션하여 이의 출력특성을 해석하였다. XeF\*(B)의 수밀도에 관련되는 XeF\*(C)의 형성에 대하여 레이저 에너지를 실험치와 비교하였다. 이 결과는 70 ns [FWHM]의 전자빔 (800 kV, 21 kA)을 사용한 대기압 매질에서 매우 좋은 일치( $28.5 \text{ mJ} \pm 5\%$ )를 보였고,  $\text{Xe}/\text{F}_2/\text{Ar} = 5.26/0.46/94.28\%$ 의 최적화된 가스혼합비를 확인하였다. 또한 시뮬레이션으로 XeF\*(C)의 형성경로, XeF\*(C)의 완화경로, 청록색 파장대역의 흡수경로에 대한  $\text{F}_2$  할로겐 도우너 및 Xe 압력의 함수관계를 조사하였다.

### I. 서 론

Xenon Fluoride(XeF) 레이저는 희가스 할라이드 (Rare-gas Halide, RgX) 계열의 엑시머중에서 유일하게 자외역과 가시역에서 레이저를 발진할 수 있는 특징 때문에 광범위한 응용이 기대되고 있다. 특히 450~530 nm의 넓은 파장대역에서 동작하는 XeF(C→A) 레이저는 해양에서의 원격탐사용 레이저 광원으로 유망할 뿐만 아니라 레이저 분광학, 물리화학, 생의학 등에 대해 응용성을 갖고 있다.

최근 XeF(C→A) 레이저에 대한 연구는 활발하여 TW급의 극초단 펄스증폭,<sup>[1]</sup> 16 nm(20000 GHz)를 갖는 free-running 때의 발진선풍(oscillation bandwidth)보다 10<sup>6</sup>배 만큼 줄인 단일모드 발생,<sup>[2]</sup> 대기압 매질의 전자빔여기 레이저<sup>[3]</sup> 및 방전여기 레이저의 개발,<sup>[4,5]</sup> 컴퓨터 시뮬레이션에 의한 B→X 천이 및 C→A 천이의 해석<sup>[6,7]</sup> 등이 보고되고 있다.

XeF(C→A)의 분광학적 해석은 XeF\* 분자의 상준위 C-상태에 대한 방사수명을 Burnham과 Harris가 보고<sup>[8]</sup> 한 이후, Kligler 등<sup>[9]</sup>은 XeF\* 엑시머 분자로부터 방사 스펙트럼 분포를 관측하였다. 이와 더불어 XeF\*(C) 상태의 형성에 대한 동력학(kinetics) 연구가 Brashears, Jr. 와 Setser,<sup>[10]</sup> Finn 등<sup>[11]</sup>에 의해 일부분 발표되었다. 그후 여기 방식에 따라 Bischel 등<sup>[12]</sup>은 전자빔으로 여기한 Xe<sub>2</sub>\* 분자로부터 방출되는 172 nm의 파장을 갖는 광에너지로 XeF<sub>2</sub>를 포함한 혼합가스를 이용한 광여기, Fisher

등<sup>[13]</sup>과 Burnham<sup>[14]</sup>은 전기방전여기, Ernst와 Tittel<sup>[15]</sup>은 전자빔여기로 레이저 발진을 각각 확인하였다.

XeF\* 엑시머의 전자천이에는 B→X(351 nm, 353 nm)와 C→A(~480 nm)가 있으며 그 발진 동력학 해석에는 B-와 C-상태가 함께 고려되어야 한다. RgX 엑시머에서 상준위의 B-와 C-상태를 고려한 이론해석은 XeCl,<sup>[16]</sup> KrF<sup>[17]</sup> 레이저에서도 보고된 바 있다. KrF 레이저의 경우는 KrF(C→A)와 Ar<sub>2</sub>F\*의 천이 스펙트럼이 서로 겹치기 때문에 Ar 완충가스(buffer gas)에서 KrF(B→X)에 대한 KrF(C→A)의 상대적인 형광강도를 관측할 수 없어 KrF(C→A) 동력학 연구가 제한 받는 이유가 된다.<sup>[18]</sup> 반면에 XeF\*분자의 C-상태는, B-상태보다 약  $700 \pm 70 \text{ cm}^{-1}$ <sup>[19,20]</sup> 만큼 낮게 위치해 있고 진동준위가 많아 상준위의 수명이 7~8배 길고( $\tau \sim 100 \text{ ns}$ ) 유도방출단면적 ( $\sigma_s \sim 1 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$ )이 작다. 따라서 C→A 천이의 레이저 발진은 B→X 천이와 서로 경쟁하며 넓은 파장대역에서 일어나 청록색 XeF(C→A) 레이저를 다양한 모드에서 연구할 수 있는 계기가 되어왔다. 대출력 고효율을 목표로하여 전자빔여기 고밀도(10 MW/cm<sup>2</sup>) 고압력(6~8 기압)<sup>[17]</sup>과 저밀도(~250 kW/cm<sup>2</sup>) 중간압력(2~3기압)<sup>[21]</sup>을 사용한 보고가 있었다. 반면에 레이저 매질의 압력을 대기압이하로 사용하는 장점을 지향한 대기압 XeF(C→A) 레이저의 특성 연구<sup>[22]</sup>가 발표되었다. 레이저 매질의 대기압화는 에너지 축적능력(stopping power)<sup>[18]</sup>이 차아지기 때문에 출력은 줄어들지만 대구경 레이저의 설계시 얇은 광학계를 사용할 수 있는 장점과 가스 취급의 용

이성, 가스 가격의 절감 등의 특징을 갖게 된다.

본 연구에서는 전자빔 여기한  $Xe/F_2/Ar$  레이저 매질에서  $B$ -와  $C$ -상태의 충돌혼합 운동과정을 포함한 시뮬레이션으로 대기압 상태의  $XeF(C \rightarrow A)$  레이저 출력특성을 가스 혼합비와 총압력의 함수로써 비교하여 실험치<sup>[3]</sup>와 잘 일치하는 결과를 얻었다. 또한 시뮬레이션으로 대기압  $XeF(C \rightarrow A)$  레이저의 특성을 해석하기 위해 레이저 상준위의  $XeF^*(C)$  형성경로(formation channel),  $XeF^*(C)$  완화경로(relaxation channel), 청록색 파장대역의 흡수경로(absorption channel)에 대한  $F_2$  할로겐 도우너(donor) 및  $Xe$  압력의 함수관계로써 조사한 바를 보고한다.

## II. 시뮬레이션 모델 설정

본 연구에 사용한 동력학 시뮬레이션은 Johnson 등<sup>[21]</sup>에 의해 보고된 0차원 계산의 수치적 모델에 바탕을 두었다. 프로그램의 주된 계산은, (1) 레이저 가스 매질로의 전자빔 축적에너지, (2) 전자온도 및 전자반응율, (3) 가스온도 및 압력에 의존하는 속도정수, (4) 레이저 에너지 및 효율 등으로 구성<sup>[22]</sup>되었다. 각 반응과 반응 과정에 대한 속도방정식은 4차 Runge-Kutta 알고리즘을 사용하여 해를 구했다. 또한 시뮬레이션 모델로 처리하기 위한 용이함을 고려해, 레이저 챔버 내에서 전자빔 축적 에너지의 균일함과 공진기를 Fabry-Perot 안정 공진기로 가정하였다. 표 1은 시뮬레이션에 사용한 주된 입력 변수로써 전자빔과 공진기 조건에 대해 나타낸다. 이 변수들은 실험을 통해 얻은 값들이다.

전자천이하는  $XeF(C \rightarrow A)$  역시며 레이저의 화학반응 과정에 대한 시뮬레이션 모델은 전자빔으로 여기된  $Xe/F_2/Ar$  레이저 혼합가스에서 진행되는 주된 과정을 다음의 4단계로 분류했다. (1) 전자빔 여기에 의한 레이저 상준위로의 이온화 및 여기과정, (2)  $XeF^*(B)$ 와  $XeF^*(C)$  상태 사이의 충돌혼합에 의한  $XeF^*(C)$  생성 및 에너지 전달과정, (3) 유도방출이 일어나기 전에 진행되는 소광(quenching)과정, (4)  $XeF^*(B)$ 와  $XeF^*(C)$  상태의 유도방출에 의한 레이저 추출 및 레이저 매질 내에서의 광자 흡수과정이다. 이온화와 여기, 2차전자와 희가스와의 소광반응들은 전자온도함수로써 고려하였다. 전자온도가 상대적으로 낮고 ( $1\sim 2$  eV) 전자밀도가 높은 영역( $10^{14}\sim 10^{15} \text{ #}/\text{m}^3$ )에서 강한 전자빔에 의해 여기된  $RgX$  혼합물의 반응들은 지극히 빠르기 때문에 2차전자에너지( $e$ )의 시간적 분포를 Maxwellian이라 가정했다. 시뮬레이션의 코드 구성은 포트란 77 언어를 사용하고, HP-9000 워크스테이션을

표 1. Used parameters in this computer simulation model. The values are measured from previous experiment<sup>[3]</sup>

|                  |                     |                                     |
|------------------|---------------------|-------------------------------------|
| <b>E-Beam</b>    | Voltage             | 800 kV                              |
|                  | Current             | 21 kA                               |
|                  | Width(FWHM)         | 70 ns                               |
|                  | Excitation Volume   | $2 \times 28 \times 6 \text{ cm}^3$ |
|                  | Deposition Energy   | 24~36 J(1~3 atm)                    |
| <b>Resonator</b> | Total Reflector (R) | 99%                                 |
|                  | Output Coupler (R)  | 97%                                 |
|                  | Length              | 65 cm                               |

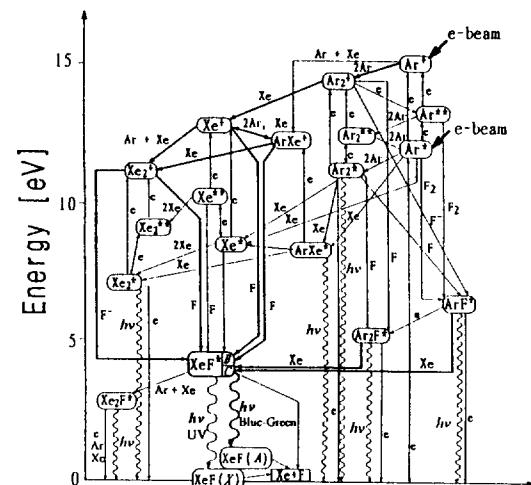


그림 1. Energy flow diagram of  $XeF^*$  in  $Xe/F_2/Ar$  laser mixture gas.

계산에 사용하였다.

### 1. 레이저 상준위로의 여기과정

그림 1은  $Xe/F_2/Ar$  혼합 가스에서의 반응경로에 대한 구성을이다. 그림에서 굵은선은  $XeF^*(B, C)$  분자가 형성되는 주된 반응과정을 나타낸다. 전자빔 여기된  $Xe/F_2/Ar$  매질에서, 전자빔 에너지는  $Ar$ 과  $Xe$ 이 여기상태로 되거나 이온화되므로써 가스에 축적된다. 에너지는 이러한 원자, 분자 및 이온들로부터 일련의 화학적 물리적 과정에 의해  $XeF$  분자의  $B$ -상태로 경로가 형성된다. 전자빔 에너지가  $B$ -상태로 축적되는 과정을 그림 1로부터 정리하면 다음의 4개 경로로 설명될 수 있다.

$$\text{E-beam} \rightarrow Ar^+ \rightarrow Ar_2^+ \rightarrow ArF^* \rightarrow Xe^+ \rightarrow XeF^*, \quad (1)$$

$$\text{E-beam} \rightarrow Ar^* \rightarrow Xe^- \rightarrow XeF^*. \quad (2)$$

표 2. Summary of reaction rate constants used in the computer simulation for the e-beam pumped XeF(B→X) and XeF(C→A) laser with Ar/Xe/F<sub>2</sub> gas mixture.  $T_e$  and  $T_g$  indicate electron temperature and gas temperature, respectively

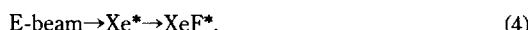
| Reaction   | Rate constant  | Reference |
|--|--|-----------|
| Electron reaction  |  |           |
| Xe + $e_p \rightarrow$ Xe <sup>+</sup> + $e_p + e_s$   | 21.7 eV/electorn-ion pair  | 23        |
| Xe + $e_p \rightarrow$ Xe <sup>*</sup> + $e_p$   | 49 eV/excited atom   | 24        |
| Ar + $e_p \rightarrow$ Ar <sup>+</sup> + $e_p + e_s$   | 26.4 eV/electron-ion pair  | 23        |
| Ar + $e_p \rightarrow$ Ar <sup>*</sup> + $e_p$   | 93 eV/excited atom   | 24        |
| Xe + $e_s \leftrightarrow$ Xe <sup>*</sup> + $e_s$   | 3.41(-9) $T_e$ 0.803exp(-11.8/ $T_e$ ) cm <sup>3</sup> /s            | 25        |
| Xe + $e_s \leftrightarrow$ Xe <sup>**</sup> + $e_s$  | 2.61(-8) $T_e$ 0.0273exp(-14.4/ $T_e$ ) cm <sup>3</sup> /s           | 25        |
| Xe <sup>*</sup> + $e_s \leftrightarrow$ Xe <sup>**</sup> + $e_s$                                     | 3.13(-7) $T_e$ 0.803exp(-2.06/ $T_e$ ) cm <sup>3</sup> /s            | 25        |
| Xe + $e_s \rightarrow$ Xe <sup>+</sup> + 2 $e_s$   | 1.92(-8) $T_e$ 0.80exp(-18.0/ $T_e$ ) cm <sup>3</sup> /s             | 25        |
| Xe <sup>*</sup> + $e_s \rightarrow$ Xe <sup>+</sup> + 2 $e_s$  | 2.27(-7) $T_e$ 0.117exp(-6.21/ $T_e$ ) cm <sup>3</sup> /s            | 25        |
| Xe <sup>**</sup> + $e_s \rightarrow$ Xe <sup>+</sup> + 2 $e_s$                                       | 6.23(-7) $T_e$ 0.12exp(-3.60/ $T_e$ ) cm <sup>3</sup> /s             | 25        |
| Xe <sub>2</sub> <sup>*</sup> + $e_s \rightarrow$ Xe <sub>2</sub> <sup>+</sup> + 2 $e_s$              | 2.83(-7) $T_e$ 0.12exp(-5.10/ $T_e$ ) cm <sup>3</sup> /s             | 25        |
| Ar + $e_s \leftrightarrow$ Ar <sup>*</sup> + $e_s$   | 3.70(-9) $T_e$ <sup>0.74</sup> exp(-17.4/ $T_e$ ) cm <sup>3</sup> /s | 26        |
| Ar + $e_s \leftrightarrow$ Ar <sup>**</sup> + $e_s$  | 1.05(-8) $T_e$ <sup>0.71</sup> exp(-19.7/ $T_e$ ) cm <sup>3</sup> /s | 26        |
| Ar <sup>*</sup> + $e_s \leftrightarrow$ Ar <sup>**</sup> + $e_s$                                     | 7.24(-7) $T_e$ <sup>0.51</sup> exp(-2.28/ $T_e$ ) cm <sup>3</sup> /s | 26        |
| Ar + $e_s \rightarrow$ Ar <sup>+</sup> + 2 $e_s$   | 1.75(-8) $T_e$ <sup>0.68</sup> exp(-23.6/ $T_e$ ) cm <sup>3</sup> /s | 26        |
| Ar <sup>*</sup> + $e_s \rightarrow$ Ar <sup>-</sup> + 2 $e_s$  | 5.18(-8) $T_e$ <sup>0.67</sup> exp(-6.27/ $T_e$ ) cm <sup>3</sup> /s | 26        |
| Ar <sup>**</sup> + $e_s \rightarrow$ Ar <sup>+</sup> + 2 $e_s$                                       | 1.41(-7) $T_e$ <sup>0.61</sup> exp(-4.00/ $T_e$ ) cm <sup>3</sup> /s | 26        |
| Ar <sub>2</sub> <sup>*</sup> + $e_s \rightarrow$ Ar <sub>2</sub> <sup>+</sup> + 2 $e_s$              | 6.78(-8) $T_e$ <sup>0.70</sup> exp(-5.25/ $T_e$ ) cm <sup>3</sup> /s | 26        |
| ArXe <sup>*</sup> + $e_s \rightarrow$ ArXe <sup>+</sup> + 2 $e_s$                                    | 6.60(-8) $T_e$ <sup>0.71</sup> exp(-5.40/ $T_e$ ) cm <sup>3</sup> /s | 26        |
| F <sub>2</sub> + $e_s \rightarrow$ F <sup>-</sup> + F  | 4.0(-9) $T_e$ <sup>-1.16</sup> cm <sup>3</sup> /s                    | 27        |
| F <sub>2</sub> + $e_s \rightarrow$ 2F  | 3.0(-10) cm <sup>3</sup> /s  | 28        |
| F + $e_s \rightarrow$ F <sup>-</sup>   | 1.0(-12) cm <sup>3</sup> /s  | 28        |
| Neutral reaction   |  |           |
| Ar <sup>*</sup> + 2Ar → Ar <sub>2</sub> <sup>*</sup> + Ar  | 3.3(-32) cm <sup>6</sup> /s  | 18        |
| Ar <sup>*</sup> + Xe + (Ar) → ArXe <sup>*</sup> + (Ar)   | 5.1(-11) cm <sup>3</sup> /s  | 29        |
| Xe <sup>*</sup> + Xe + Ar → Xe <sub>2</sub> <sup>*</sup> + Ar  | 2.3(-32) cm <sup>6</sup> /s  | 30        |
| Ar <sup>**</sup> + Ar → Ar <sup>*</sup> + Ar   | 1.0(-10) cm <sup>3</sup> /s  | 26        |
| Xe <sup>**</sup> + Xe → Xe <sup>*</sup> + Xe   | 1.0(-10) cm <sup>3</sup> /s  | 31        |
| Ar <sup>*</sup> + Xe → Xe <sup>*</sup> + Ar  | 2.1(-10) cm <sup>3</sup> /s  | 29        |
| Ar <sub>2</sub> <sup>*</sup> + Xe → Xe <sup>*</sup> + 2Ar  | 2.4(-10) cm <sup>3</sup> /s  | 18        |
| Ar <sub>2</sub> <sup>*</sup> + Xe → ArXe <sup>*</sup> + Ar   | 5.0(-11) cm <sup>3</sup> /s  | 32        |
| Xe <sub>2</sub> <sup>**</sup> + M → Xe <sup>*</sup> + Xe + M   | 1.0(-11) cm <sup>3</sup> /s  | 24        |
| Ar <sub>2</sub> <sup>**</sup> + M → Ar <sup>*</sup> + Ar + M   | 1.0(-11) cm <sup>3</sup> /s  | 24        |
| Penning ionization   |  |           |
| Xe <sup>*</sup> + Xe <sup>*</sup> → Xe <sup>+</sup> + Xe + e   | 5.0(-10) cm <sup>3</sup> /s  | 32        |
| Xe <sub>2</sub> <sup>*</sup> + Xe <sub>2</sub> <sup>*</sup> → Xe <sub>2</sub> <sup>-</sup> + 2Xe + e | 5.0(-10) cm <sup>3</sup> /s  | 32        |
| Ar <sup>*</sup> + Ar <sup>*</sup> → Ar <sup>+</sup> + Ar + e   | 5.0(-10) cm <sup>3</sup> /s  | 33        |
| Charge transfer  |  |           |
| Ar <sup>+</sup> + 2Ar → Ar <sub>2</sub> <sup>+</sup> + Ar  | 2.5(-31) cm <sup>6</sup> /s  | 24        |
| Ar <sup>+</sup> + Xe + Ar → ArXe <sup>+</sup> + Ar   | 1.0(-31) cm <sup>6</sup> /s  | 34        |
| Xe <sup>+</sup> + 2Ar → ArXe <sup>+</sup> + Ar   | 1.0(-31) cm <sup>6</sup> /s  | 35        |
| Xe <sup>+</sup> + Xe + Ar → Xe <sub>2</sub> <sup>+</sup> + Ar  | 2.0(-31) cm <sup>6</sup> /s  | 36        |
| Ar <sub>2</sub> <sup>+</sup> + Xe → Xe <sup>+</sup> + 2Ar  | 1.0(-9) cm <sup>3</sup> /s   | 36        |
| ArXe <sup>+</sup> + Xe → Xe <sub>2</sub> <sup>+</sup> + Ar   | 1.0(-11) cm <sup>3</sup> /s  | 37        |
| ArXe <sup>+</sup> + Xe → Xe <sup>+</sup> + Ar + Xe   | 5.0(-10) cm <sup>3</sup> /s  | 37        |

표 2. Continued

| Reaction   | Rate constant                                   | Reference |
|--|---|-----------|
| Dimer-ion electron recombination   |   |           |
| $\text{Ar}_2^+ + e_s \rightarrow \text{Ar}^{**} + \text{Ar}$                                   | $1.5(-9)(T_g/T_e)^{0.67} \text{ cm}^3/\text{s}$ | 38        |
| $\text{Xe}_2^+ + e_s \rightarrow \text{Xe}^{**} + \text{Xe}$                                   | $1.5(-8)(T_g/T_e)^{0.5} \text{ cm}^3/\text{s}$  | 39        |
| $\text{ArXe}^- + e_s \rightarrow \text{Xe}^{**} + \text{Ar}$                                   | $1.5(-8)(T_g/T_e)^{0.5} \text{ cm}^3/\text{s}$  | 35        |
| Radiation  |   |           |
| $\text{XeF}^*(B) \rightarrow \text{XeF}(X) + h\nu_{uv}$  | $7.70(+7) / \text{s}$                           | 10, 40    |
| $\text{XeF}^*(B) + h\nu_{uv} \rightarrow \text{XeF}(X) + 2h\nu_{uv}$                           | $4.00(-16) \text{ cm}^2/\text{s}$               | 41, 42    |
| $\text{XeF}^*(C) \rightarrow \text{XeF}(A) + h\nu_{BG}$  | $1.00(+7) / \text{s}$                           | 10, 40    |
| $\text{XeF}^*(C) + h\nu_{BG} \rightarrow \text{XeF}(A) + 2h\nu_{BG}$                           | $1.00(-18) \text{ cm}^2/\text{s}$               | 40        |
| $\text{Xe}_2^* \rightarrow 2\text{Xe} + \text{F} + h\nu$                                       | $6.58(+6) / \text{s}$                           | 43, 44    |
| $\text{ArF}^* \rightarrow \text{Ar} + \text{F} + h\nu$   | $2.38(+8) / \text{s}$                           | 20        |
| $\text{Ar}_2\text{F}^* \rightarrow 2\text{Ar} + \text{F} + h\nu$                               | $4.40(+6) / \text{s}$                           | 45        |
| Ion-ion recombination  |   |           |
| $\text{Xe}^+ + \text{F}^- (+ \text{M}) \rightarrow \text{XeF}^*(B) (+ \text{M})$               | Pressure  |           |
| $\text{Xe}_2^+ + \text{F}^- (+ \text{M}) \rightarrow \text{XeF}^*(B) + \text{Xe} (+ \text{M})$ | dependent                                       |           |
| $\text{Ar}^+ + \text{F}^- (+ \text{M}) \rightarrow \text{ArF}^* (+ \text{M})$                  | rate constant                                   | 23        |
| $\text{Ar}_2^+ + \text{F}^- (+ \text{M}) \rightarrow \text{ArF}^* + \text{Ar} (+ \text{M})$    |   |           |
| $\text{ArXe}^+ + \text{F}^- (+ \text{M}) \rightarrow \text{XeF}^*(B) + \text{Ar} (+ \text{M})$ |   |           |
| $\text{Xe}_2^* + \text{F}_2 \rightarrow \text{XeF}^*(B) + \text{Xe} + \text{F}$                | $5.0(-10) \text{ cm}^3/\text{s}$                | 48        |
| Neutral formation  |   |           |
| $\text{Xe}^* + \text{F}_2 \rightarrow \text{XeF}^*(B) + \text{F}$                              | $7.5(-10) \text{ cm}^3/\text{s}$                | 46        |
| $\text{Xe}^{**} + \text{F}_2 \rightarrow \text{XeF}^*(B) + \text{F}$                           | $7.5(-10) \text{ cm}^3/\text{s}$                | 47        |
| $\text{Xe}_2^* + \text{F}_2 \rightarrow \text{Xe}_2\text{F}^* + \text{F}$                      | $2.5(-10) \text{ cm}^3/\text{s}$                | 55        |
| $\text{Xe}_2^{**} + \text{F}_2 \rightarrow \text{XeF}^*(B) + \text{Xe} + \text{F}$             | $5.0(-10) \text{ cm}^3/\text{s}$                | 49        |
| $\text{Xe}_2^{**} + \text{F}_2 \rightarrow \text{Xe}_2\text{F}^* + \text{F}$                   | $2.5(-10) \text{ cm}^3/\text{s}$                | 50        |
| $\text{Ar}^* + \text{F}_2 \rightarrow \text{ArF}^* + \text{F}$                                 | $7.5(-10) \text{ cm}^3/\text{s}$                | 46        |
| $\text{Ar}_2^* + \text{F}_2 \rightarrow \text{Ar}_2\text{F}^* + \text{F}$                      | $2.5(-10) \text{ cm}^3/\text{s}$                | 59        |
| $\text{Ar}_2^{**} + \text{F}_2 \rightarrow \text{ArF}^* + \text{Ar} + \text{F}$                | $5.2(-10) \text{ cm}^3/\text{s}$                | 51        |
| $\text{ArXe}^* + \text{F}_2 \rightarrow \text{XeF}^*(B) + \text{Ar} + \text{F}$                | $5.0(-10) \text{ cm}^3/\text{s}$                | 48        |
| $\text{F}^* + \text{F}_2 \rightarrow \text{F}_2^* + \text{F}$                                  | $5.0(-10) \text{ cm}^3/\text{s}$                | 52        |
| $\text{F}_2^* + \text{F}_2 \rightarrow 2\text{F}_2$  | $3.5(-10) \text{ cm}^3/\text{s}$                | 52        |
| Displacement XeF* formation  |   |           |
| $\text{ArF}^* + \text{Xe} \rightarrow \text{XeF}^*(B) + \text{Ar}$                             | $1.6(-9) \text{ cm}^3/\text{s}$                 | 53        |
| $\text{Ar}_2\text{F}^* + \text{Xe} \rightarrow \text{XeF}^*(B) + 2\text{Ar}$                   | $2.0(-10) \text{ cm}^3/\text{s}$                | 54        |
| Xe <sub>2</sub> F* relaxation  |   |           |
| $\text{Xe}_2\text{F}^* + \text{Xe} \rightarrow 3\text{Xe} + \text{F}$                          | $1.0(-13) \text{ cm}^3/\text{s}$                | 20, 43    |
| $\text{Xe}_2\text{F}^* + \text{Ar} \rightarrow 2\text{Xe} + \text{F} + \text{Ar}$              | $2.8(-14) \text{ cm}^3/\text{s}$                | 20, 43    |
| $\text{Xe}_2\text{F}^* + \text{F}_2 \rightarrow 2\text{Xe} + 3\text{F}$                        | $2.0(-10) \text{ cm}^3/\text{s}$                | 55        |
| $\text{Xe}_2\text{F}^* + e_s \rightarrow 2\text{Xe} + \text{F} + e_s$                          | $1.5(-7) \text{ cm}^3/\text{s}$                 | guessed   |
| Ar <sub>2</sub> F* relaxation  |   |           |
| $\text{Ar}_2\text{F}^* + \text{Ar} \rightarrow 3\text{Ar} + \text{F}$                          | $2.8(-13) \text{ cm}^3/\text{s}$                | 51        |
| $\text{Ar}_2\text{F}^* + \text{F}_2 \rightarrow 2\text{Ar} + 3\text{F}$                        | $2.0(-10) \text{ cm}^3/\text{s}$                | 56        |
| $\text{Ar}_2\text{F}^* + e_s \rightarrow 2\text{Ar} + \text{F} + e_s$                          | $1.0(-7) \text{ cm}^3/\text{s}$                 | 32        |
| ArF* relaxation  |   |           |
| $\text{ArF}^* + \text{Ar} \rightarrow 2\text{Ar} + \text{F}$                                   | $8.6(-12) \text{ cm}^3/\text{s}$                | 53        |
| $\text{ArF}^* + \text{F}_2 \rightarrow \text{Ar} + 3\text{F}$                                  | $1.8(-9) \text{ cm}^3/\text{s}$                 | 56        |
| $\text{ArF}^* + e_s \rightarrow \text{Ar} + \text{F} + e_s$                                    | $1.6(-7) \text{ cm}^3/\text{s}$                 | 57        |
| XeF*(B) relaxation   |   |           |
| $\text{XeF}^*(B) + \text{Xe} \rightarrow 2\text{Xe} + \text{F}$                                | $3.3(-11) \text{ cm}^3/\text{s}$                | 32, 42    |

표 2. Continued

| Reaction  | Rate constant               | Reference |
|---|-----------------------------|-----------|
| XeF*(B)+Ar→Xe+F+Ar  | 4.9(-12) cm <sup>3</sup> /s | 32, 58    |
| XeF*(B)+F <sub>2</sub> →Xe+3F   | 2.1(-10) cm <sup>3</sup> /s | 19        |
| XeF*(B)+e <sub>s</sub> →Xe+F+e <sub>s</sub>                                     | 1.5(-7) cm <sup>3</sup> /s  | 32        |
| UV absorption   |                             |           |
| Xe <sup>*</sup> +hv <sub>uv</sub> →Xe <sup>+</sup> +e                           | 2.2(-19) cm <sup>2</sup>    | 59        |
| Xe <sub>2</sub> <sup>*</sup> +hv <sub>uv</sub> →Xe <sub>2</sub> <sup>+</sup> +e | 1.0(-19) cm <sup>2</sup>    | 60        |
| Xe <sub>2</sub> <sup>+</sup> +hv <sub>uv</sub> →Xe <sup>+</sup> +Xe             | 3.3(-17) cm <sup>2</sup>    | 61        |
| Ar <sup>*</sup> +hv <sub>uv</sub> →Ar <sup>+</sup> +e                           | 1.1(-19) cm <sup>2</sup>    | 59        |
| Ar <sub>2</sub> <sup>*</sup> +hv <sub>uv</sub> →Ar <sub>2</sub> <sup>+</sup> +e | 1.9(-19) cm <sup>2</sup>    | 62        |
| Ar <sub>2</sub> <sup>+</sup> +hv <sub>uv</sub> →Ar <sup>+</sup> +Ar             | 1.0(-17) cm <sup>2</sup>    | 32        |
| ArXe <sup>*</sup> +hv <sub>uv</sub> →ArXe <sup>+</sup> +e                       | 1.0(-19) cm <sup>2</sup>    | 61        |
| ArXe <sup>+</sup> +hv <sub>uv</sub> →Xe <sup>+</sup> +Ar+e                      | 1.0(-17) cm <sup>2</sup>    | 32        |
| F <sub>2</sub> +hv <sub>uv</sub> →2F  | 5.3(-21) cm <sup>2</sup>    | 63        |
| F <sup>-</sup> +hv <sub>uv</sub> →F+e <sub>s</sub>                              | 2.2(-18) cm <sup>2</sup>    | 64        |
| XeF*(C) relaxation  |                             |           |
| XeF*(C)+Ar→Products   | 4.5(-14) cm <sup>3</sup> /s | 44        |
| XeF*(C)+Xe→Products   | 8.8(-11) cm <sup>3</sup> /s | 44        |
| XeF*(C)+Ar+Xe→Products  | 3.9(-31) cm <sup>6</sup> /s | 44        |
| XeF*(C)+2Ar→Products  | 3.0(-33) cm <sup>6</sup> /s | 44        |
| XeF*(C)+2Xe→Products  | 4.0(-32) cm <sup>6</sup> /s | 44        |
| XeF*(C)+F <sub>2</sub> →Xe+3F   | 2.0(-10) cm <sup>3</sup> /s | 19        |
| XeF*(C)+F→XeF(X)+F  | 1.1(-9) cm <sup>3</sup> /s  | 40        |
| Blue-Green absorption   |                             |           |
| Ar <sup>**</sup> +hv <sub>BG</sub> →Ar <sup>+</sup> +e                          | 1.5(-17) cm <sup>2</sup>    | 54        |
| Xe <sup>**</sup> +hv <sub>BG</sub> →Xe <sup>+</sup> +e                          | 2.0(-17) cm <sup>2</sup>    | 54        |
| Ar <sub>2</sub> <sup>+</sup> +hv <sub>BG</sub> →Ar <sup>+</sup> +e              | 1.5(-17) cm <sup>2</sup>    | 54        |
| XeF* B-C Collisional Mixing   |                             |           |
| XeF*(B)+Xe→XeF*(C)+Xe   | 6.1(-10) cm <sup>3</sup> /s | 19        |
| XeF*(B)+Ar→XeF*(C)+Ar   | 8.6(-12) cm <sup>3</sup> /s | 6, 19     |
| XeF*(B)+F <sub>2</sub> →XeF*(C)+F <sub>2</sub>                                  | 5.0(-11) cm <sup>3</sup> /s | 29        |
| XeF*(B)+e <sub>s</sub> →XeF*(C)+e <sub>s</sub>                                  | 1.0(-7) cm <sup>3</sup> /s  | 29        |
| Lifetime  |                             |           |
| XeF*(B)   | 13.2(-9) s                  | 19, 20    |
| XeF*(C)   | 100(-9) s                   | 19, 20    |



이와같은 모든 경로들은 XeF\* 형성의 직접적인 모체(precursor)가 되는 Xe<sup>+</sup> 또는 Xe<sup>\*</sup>을 형성하도록 이끈다. Xe/F<sub>2</sub>/Ar 모델에서의 모든 반응과정은 속도정수를 갖고 있고, 표 2에 XeF(C→A) 모델에 직접적인 관계가 되는 중요한 반응을 나타냈다. 그림 1에 보여진 반응순서의 결과는 전자적으로 여기된 XeF의 두 상태인 B와 C를 1차적으로 혼합한다. 레이저 상준위의 형성에 대한 모델을 개발하기 위해서는 이러한 두 상태로 여기되는

다양한 반응에 대한 분지율(branching ratio)을 고려하지 않으면 않된다. 이 관점에서, 전자빔으로 여기된 Ar/Xe/NF<sub>3</sub> 혼합가스에서 B-상태가 처음 형성되고 C-상태는 부수적인 충돌혼합에 의해 형성된다고 발표한 Walter 등<sup>[43]</sup>의 보고가 있었다. 전자빔여기된 혼합가스에 대해 Fisher와 Center<sup>[13]</sup>는 XeF<sub>2</sub> 혼합물의 광분석에서도 B-상태가 먼저형성되고 C-상태는 부수적인 중간상태의 충돌혼합으로 생성됨을 보였다. 분지율에 대한 보고는 몇몇 그룹<sup>[11,19,43]</sup>의 이견이 있으나, 우리는 Walter 등<sup>[43]</sup>의 최근의 자료를 가지고, 이온과 중성 여기경로(pumping

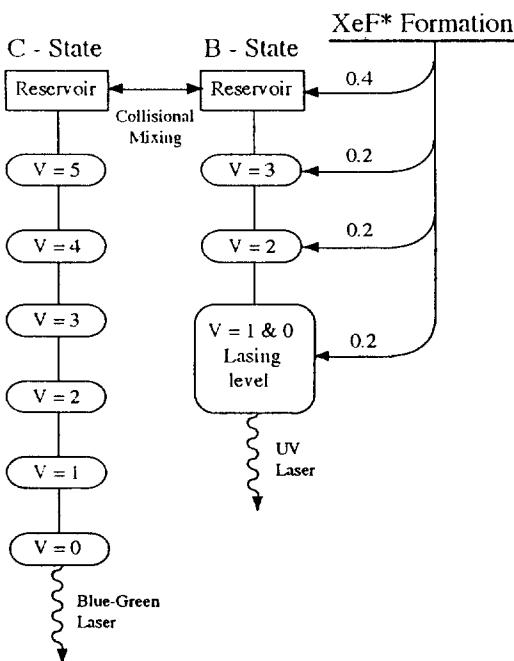


그림 2. Block diagram of the upper state model of XeF laser with respect to the B-C interstate mixing and vibrational relaxation processes.

channel)들이) XeF\*(B) 상태로의 1에 가까운 분지율을 갖는다고 가정했다. 이것은 직접적인 XeF\*(C)의 형성이 없다고 보는 것이다. 그렇지만 각 형성반응에 대한 실질적인 분지율이 밝혀지지 않은 채로 남아있고 XeF\*(B)과 XeF\*(C)의 효율적인 분지는 레이저 가스의 총압력과 혼합비율의 의존성을 갖는다. B-와 C-상태의 진동준위에 대해서는 모두 단일준위로 취급하여 모델링하였다. 본 시뮬레이션은 레이저 에너지 및 효율에 대해 모델을 설정하였고, 각각의 진동준위에 대한 스펙트럼에 대해서는 모델화 하지 않았다.

## 2. XeF\*(B)와 XeF\*(C) 상태의 충돌혼합

그림 2는 레이저 상준위에서 XeF\*(B)와 XeF\*(C) 상태의 상호작용을 구성도로써 나타낸 것이다. C-상태는 먼저 형성된 B-상태로부터 충돌혼합과정에 의해 형성됨을 보이며, XeF\*(B, C)는 각각 완화과정을 통해 진동준위로 떨어지게 되어 상준위 퍼텐셜의 최하단으로 이른다.<sup>[20,32]</sup> 이와같은 XeF\*(B)와 XeF\*(C) 상태를 나타내는 시정수들 사이에서의 관계를 Sauerbrey 등<sup>[20]</sup>에 의한 보고를 인용하면 다음과 같다.

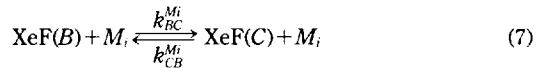
$$\frac{d[B]}{dt} = P_B + \nu[C] - u[B] - \frac{[B]}{\tau_1} \quad (5)$$

$$\frac{d[C]}{dt} = P_C + u[B] - \nu[C] - \frac{[C]}{\tau_2}, \quad (6)$$

여기서,  $u$ 와  $\nu$ 는 다음으로 정의한다.

$$u = \sum_{i=1}^n k_{BC}^{Mi} [M_i], \quad \nu = \sum_{i=1}^n k_{CB}^{Mi} [M_i],$$

여기서,  $[B]$ ,  $[C]$ 는 각각 XeF(B), XeF(C)의 밀도를 나타낸다.  $P_B$ 와  $P_C$ 는 XeF\*(B)와 XeF\*(C) 상태에 대한 생성비율이고,  $u$ 와  $\nu$ 의 양은 B-와 C-상태 사이에서의 충돌혼합을 나타낸다.  $[M_i]$ 는 가스혼합물에서 발생하는 충돌 상대률로써 주로 Ar, Xe, F<sub>2</sub>, 전자를 의미하고,  $k_{BC}^{Mi}$ ,  $k_{CB}^{Mi}$ 는 다음의 반응에 대한 혼합상수를 나타낸다.



C-상태의 형성이 초기전자에너지에 의해 직접적으로 이루어지지 않고 B-상태와의 충돌을 경유해 이루어지므로  $P_C$ 는 무시할 수 있다. 식 (5), (6)에 대한 최초의 조건이  $B(t=0)=B_0$ ,  $C(t=0)=0$ 으로 그의 해는 다음과 같다.

$$B(t) = b_1 e^{\lambda_1 t} + b_2 e^{\lambda_2 t}, \quad (8)$$

$$C(t) = c_1 (e^{\lambda_1 t} - e^{\lambda_2 t}). \quad (9)$$

여기서,

$$\lambda_{1,2} = \frac{\beta + \gamma}{2} \pm \frac{1}{2} \{(\beta - \gamma)^2 + 4uv\}^{1/2}, \quad (10)$$

이고,  $\beta = u + \frac{1}{\tau_1}$ ,  $\gamma = v + \frac{1}{\tau_2}$ 이다.

따라서 B-상태는 먼저  $\tau_1^{-1}(\lambda_1)$ 의 붕괴주파수로 빨리 붕괴하고 충돌혼합에 의해 열평형상태에 도달한 후, B-와 C-상태는  $\tau_2^{-1}(\lambda_2)$ 의 붕괴주파수로 천천히 붕괴하게 된다. 속도식 (5), (6)은 다른 원자, 분자 및 이온의 시간적으로 적분된 강도에 대한 식으로 변환되어 다음과으로 주어진다.

$$I_B = \frac{1}{\tau_B} \int_0^\infty B(t) dt, \quad I_C = \frac{1}{\tau_C} \int_0^\infty C(t) dt. \quad (11)$$

두 상태들 사이에서 혼합과정이 열평형상태(thermal equilibrium state)에 이르기에 충분히 빠르다면,  $k_{CB}^{Mi}/k_{BC}^{Mi}$ 의 알려진 값은 B-와 C-상태의 에너지 차를 결정하며 관

계식은 다음과 같다.

$$\frac{B(t)}{C(t)} = \frac{k_{CB}^{M_i}}{k_{BC}^{M_i}} = \exp(-\Delta E/kT). \quad (12)$$

$\Delta E$ 는  $B$ -와  $C$ -상태사이에서의 에너지 차,  $k$ 는 불쓰만상수,  $T$ 는 절대온도이다. 여기서  $B$ -상태가  $C$ -상태 위( $\Delta E \approx 700 \text{ cm}^{-1}$ [19,20])에 위치해 있으므로, 이 값은 통계적으로 거의 1의 값을 갖는다. 이것은  $B$ -와  $C$ -상태의 충돌혼합이 오직 순방향( $B \rightarrow C$ )으로만 진행하는 것을 보여,[6] 본 시뮬레이션 모델에서는  $k_{CB}^{M_i}$ 는 무시하고  $k_{BC}^{M_i}$ 만을 고려하였다.

### III. 시뮬레이션 모델의 검증

XeF 엑시머 레이저의 상준위  $B$ -와  $C$ -상태를 해석한 컴퓨터 시뮬레이션 모델의 유용성은 이전에 보고된 실험의 결과들[3]과 계산한 결과를 비교하므로써 확인되었다. 가스압력 1 기압의 레이저 매질에서 XeF(C→A) 레이저출력 에너지에 대한 시뮬레이션과 실험의 비교가 할로겐 도우너 함수로써 그림 3에 보인다. 그림의 검은원(●)은 Xe 가스압력을 30 torr로 고정하고 F<sub>2</sub> 가스의 양을 변화하여 얻은 실험결과이다. 실험에서 F<sub>2</sub> 3.5 torr일 때

펄스당 약 26 mJ의 XeF(C→A) 레이저 에너지를 얻었고, 여기서 F<sub>2</sub> 가스는 F<sub>2</sub>와 He이 각각 50:50으로 혼합된 것을 사용하였으나 본 고에서 F<sub>2</sub>의 정량적인 값은 이하의 표현에서 He을 고려하지 않은 순수 F<sub>2</sub> 값으로 기술했다. 물론 실선(—)으로 얻은 시뮬레이션에서도 He의 양은 고려되지 않았다. 왜냐하면 He에 대한 전자빔의 에너지 축적능력은 완충가스로 사용된 Ar의 양에 비해 극히 작기 때문에 무시할 수 있다. 그럼 3의 실험값에 한 점으로 표현한 데이터는 실험에서 매회 새로운 레이저 가스에 대해 2회씩 5회를 반복 측정하여 높은 반복률을 얻은 값에 대해 기록한 것이다. 이때 측정값의 오차는 전자빔 입력 에너지 및 레이저 가스의 수동공급에 의한 혼합비의 오차에 의해 발생되는 것으로 판단된다. 그럼 4와 5에서도 같은 방법으로 실험하고 데이터를 처리하였다. 그림 4는 F<sub>2</sub>의 압력을 3.5 torr로 고정했을 때 Xe 압력 변화에 대한 XeF(C→A) 레이저 에너지를 나타낸 것이며 검은원과 실선의 의미는 그림 3과 같다. 실험에서는 Xe 가스 압력이 35~45 torr에서 유사한 최대 출력 에너지가 얻어졌으나 시뮬레이션 계산에서는 40 torr에서 최대 에너지가 나타났다. 그림 3, 4에서 나타난 것처럼 비교적 실험치와 잘 일치하는 시뮬레이션 결과로부터, 전체 가스압력 1 기압의 레이저 매질에서, F<sub>2</sub>와 Xe의

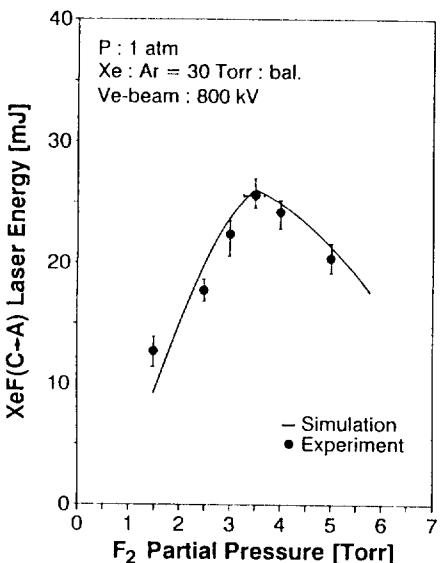


그림 3. Comparisons of XeF(C→A) laser output energy between simulation and experiment as a function of F<sub>2</sub> partial pressure at atmospheric pressure gas mixture. Experimental conditions are depicted within the figure.

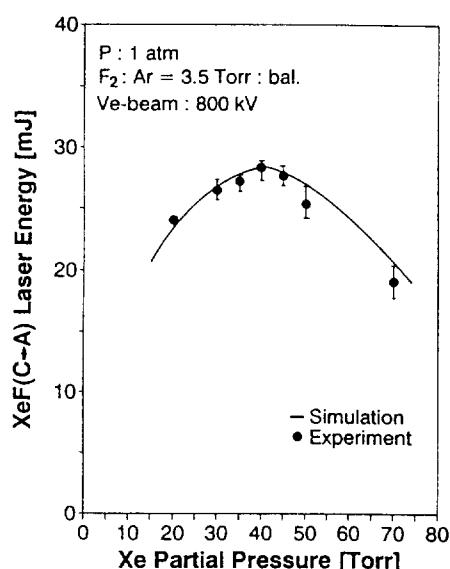


그림 4. Comparisons of XeF(C→A) laser output energy between simulation and experiment as a function of Xe partial pressure at atmospheric pressure gas mixture. Experimental conditions are depicted within the figure.

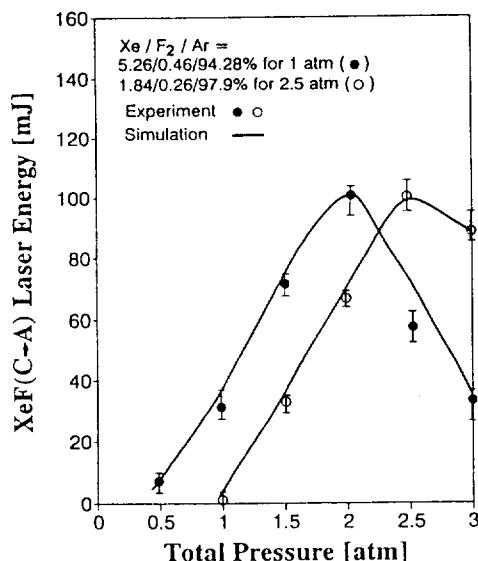


그림 5. Comparisons of XeF( $C \rightarrow A$ ) laser output energy between simulation and experiment as a function of total gas pressure. The optimal conditions of Xe/F<sub>2</sub>/Ar gas mixture are fixed with 1.84/0.26/97.9% and 5.26/0.46/94.28% for 2.5 atm and 1 atm, respectively.

최적화된 값을 각각 3.5 torr와 40 Torr로 결정할 수 있었다.

그림 5는 전체 가스압력 변화에 대한 XeF( $C \rightarrow A$ ) 레이저 출력 에너지를 나타낸 것이다. 여기서 원들(●, ○)과 실선은 각각 실험과 시뮬레이션 결과이며, Xe/F<sub>2</sub>/Ar의 혼합비는 5.26/0.46/94.28%, 1.84/0.26/97.9%에 대해 각각 검은원(●)과 흰원(○)으로 나타냈다. 5.26/0.46/94.28%의 혼합비는 그림 3과 4의 1 기압 조건에 얻은 F<sub>2</sub> 3.5 torr와 Xe 40 torr로부터 환산하여 얻은 최적화한 값이며, 또한 총압력 2.5 기압에서도 같은 실험절차를 통해 최적화한 1.84/0.26/97.9%의 혼합비를 얻었다. 2.5 기압에 대한 F<sub>2</sub> 및 Xe의 분압에 따른 출력에너지를 나타낸 결과는 본 논문에서 보이지 않았다. 혼합비가 다른 두 조건으로써 전체압력을 변화하며 얻은 출력에너지는 2, 2.5 기압에서 유사한 약 100 mJ로 측정되었다. 혼합비를 고정하고 전체압력을 낮출수록 레이저 에너지는 감소되어 1 기압 조건에서는 약 1 mJ의 에너지가 출력되었다. 레이저 가스 매질의 압력이 낮아지면 전자빔 축적에너지가 작아지므로 레이저 여기율또한 작아져 출력에너지 역시 줄어들며, 이것은 RgX 엑시머 레이저의 XeCl 실험<sup>[65]</sup>에서도 같은 결과를 보였다. 각각의 혼합비에 대한 레이저 가스의

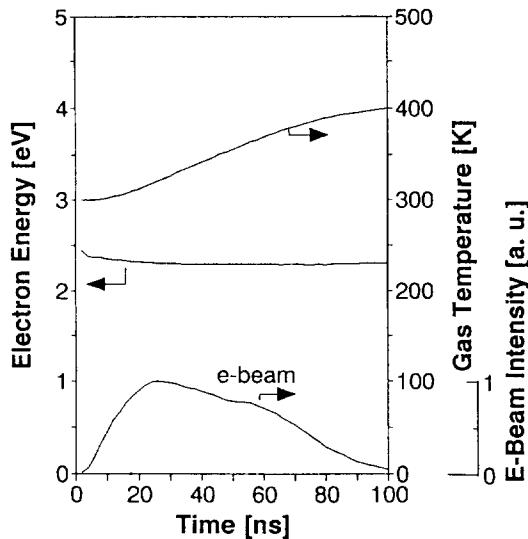


그림 6. Calculated temporal histories of an electron energy, gas temperature, and measured electron-beam current of 21 kA (70 ns, FWHM) which is sampled in simulation input data.

압력이 2, 2.5 기압보다 큰 영역으로의 압력증가는 출력에너지가 감소하게 되는데, 이것은 Ar 및 Xe에 의한 XeF\*(C)의 소광의 증가와 청록색 파장에 대한 광흡수가 증가하는 것으로 해석된다. 1 기압의 최적화된 혼합비 조건에서, 실험과 시뮬레이션을 통해 얻은 XeF( $C \rightarrow A$ ) 레이저는 출력 평균 에너지는 약 28.5 mJ과 31.5 mJ이다. 이와 같은 결과는 2.5 기압에서 최적화된 결과와는 매우 큰 차이를 보이고 있다. 이것은 XeF( $C \rightarrow A$ ) 레이저의 동력학이 가스분자의 수밀도와 압력에 대한 복잡한 함수라고 생각되며, 이와 같은 내용을 시뮬레이션으로 분석한 결과는 대기압 매질을 중심으로 다음 장에서 토론될 것이다. 이상의 결과들로부터 우리가 개발한 XeF( $C \rightarrow A$ ) 엑시머 레이저의 시뮬레이션 모델이 실험에서 얻은 레이저 출력과 잘 일치하므로 설정한 모델이 매우 유용하다고 생각된다.

#### IV. 결과 및 토론

그림 6은 가스온도와 2차전자에너지에 대한 시간변화를 계산에 의해 나타낸 것이다. 전자빔 전류파형은 실험에서 측정한 약 21 kA(70 ns, FWHM)의 값을 샘플링하여 시뮬레이션 데이터로 입력하였다. 전자빔 에너지가 일정한 체적의 레이저 매질에 주입되는 동안 가스온도

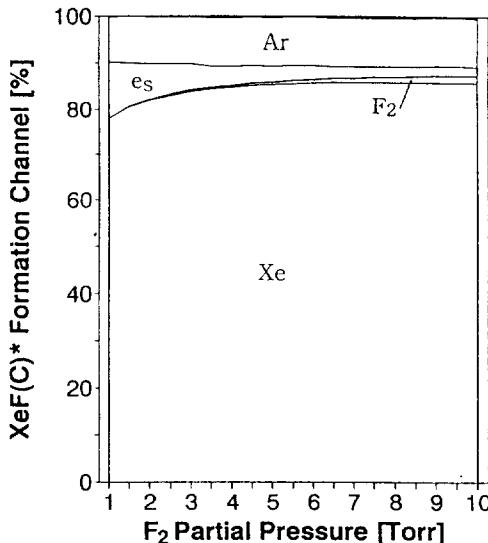


그림 7. Calculated  $\text{XeF}^*(\text{C})$  formation channels as a function of  $\text{F}_2$  partial pressure. Mixture gas condition is  $\text{Xe}/\text{Ar}=30 \text{ Torr/balance}$  at atmospheric pressure. The excitation rate is about  $1 \text{ MW/cm}^3$ .

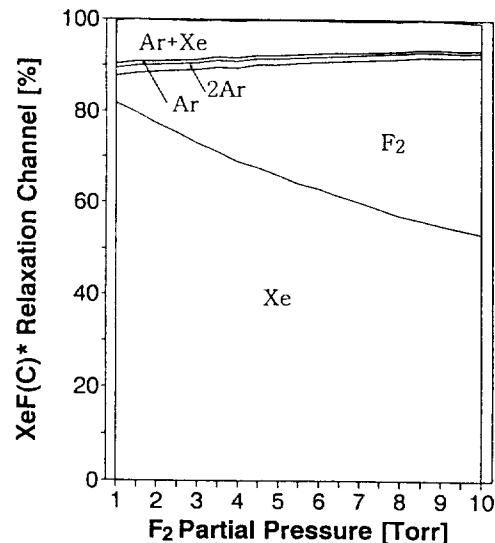


그림 8. Calculated  $\text{XeF}^*(\text{C})$  relaxation channels as a function of  $\text{F}_2$  partial pressure. Mixture gas condition is the same as figure 7. The excitation rate is about  $1 \text{ MW/cm}^3$ .

( $T_s$ )와 2차전자에너지( $T_e$ )는 레이저 가스의 혼합비와 총 압력에 따라 변화받게 된다. 동일한 전자빔 에너지가 주입될 때 압력은 온도에 비례하며, 2차전자에너지는 큰 변화는 없으나 다소 낮아지는 것으로 나타났다. 이때 레이저 매질의 조건은 그림 5와 동일한 대기압의  $\text{Xe}/\text{F}_2/\text{Ar}=40/3.5/716.5 \text{ Torr}^3$ 이다. 여기에서 가스온도는 온도 및 압력에 의존하는 속도정수의 계산에서 중요한 파라메타로 작용하기 때문에 시뮬레이션의 첫 계산 순서가 되고 있다.

그림 7은  $\text{F}_2$  압력변화에 대한  $\text{XeF}^*(\text{C})$  형성경로를 계산하여 백분율로 나타낸 것이며, 가스매질은  $\text{Xe}/\text{Ar}=30 \text{ Torr/balance}$ 의 대기압을 조건으로하여 그림 3과 동일한 상태로 유지했다.  $\text{XeF}^*(\text{C})$  상태는  $\text{Xe}$ ,  $\text{Ar}$ ,  $\text{F}_2$  및 2차전자( $e_s$ )가  $\text{XeF}^*(\text{B})$ 와의 충돌혼합에 의해 형성되며, 희가스( $\text{Xe}$  및  $\text{Ar}$ )에 의한 반응은  $\text{F}_2$  양에 관계없이  $\text{XeF}^*(\text{C})$  형성에 지배적인 것을 알 수 있다. 반면에  $\text{F}_2$  분자에 의한 충돌혼합은  $\text{F}_2$  양의 증가에 비례해  $\text{XeF}^*(\text{C})$  형성에 기여하는 것으로 나타났다. 2차전자에 의한  $\text{XeF}^*(\text{B})$ 와의 충돌혼합은  $\text{F}_2$  양이 증가할수록 감소하는데, 이것은 F의 전자부착력이 커서  $e_s$ 의 양이 계속 감소하는 원인이 되는 것으로 고려된다. 그림 8은 원자 및 분자와의 충돌반응에 의해 레이저 천이가 일어나기 전에  $\text{XeF}^*(\text{C})$  상태의 완화경로를 계산한 결과로 이 때 유도방출과 자연방출은

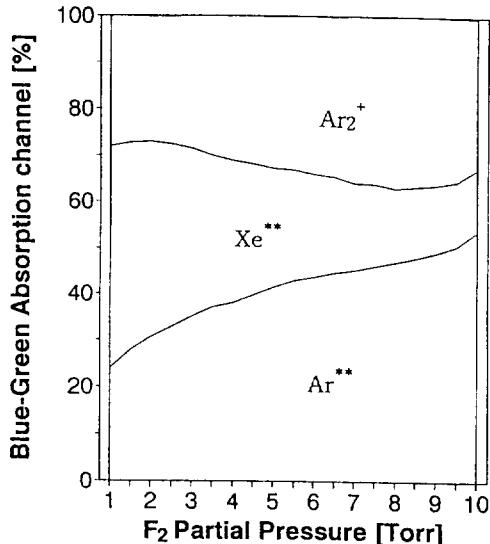


그림 9. Calculated blue-green absorption channels as a function of  $\text{F}_2$  partial pressure. Mixture gas condition is the same as figure 7. The excitation rate is about  $1 \text{ MW/cm}^3$ .

이곳에서 표현하지 않았다. 바꿔말하면 그림 8은 레이저 천이에 있어서 손실항을 의미한다. 또한 완화과정에서도  $\text{F}_2$  양을 10 Torr 까지 계속 증가해도  $\text{Xe}$ 의 기여도가

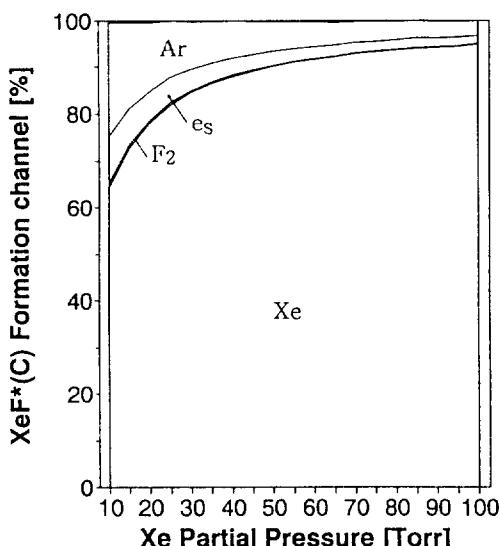


그림 10. Calculated  $\text{XeF}^*(\text{C})$  formation channels as a function of Xe partial pressure. Mixture gas condition is  $\text{F}_2/\text{Ar}=3.5 \text{ Torr/balance}$  at atmospheric pressure. The excitation rate is about  $1 \text{ MW/cm}^3$ .

지배적임을 알 수 있으며, 이 점은 그림 7에서 보인 충돌혼합에 의한  $\text{XeF}^*(\text{C})$  형성에서의 Xe의 역할과는 이면성을 보이고 있다.  $\text{F}_2$  분자의 양이 증가하면서  $\text{XeF}^*(\text{C})$ 의 완화율이 급격히 증가하게 되어  $\text{F}_2$ 의 최적화가 매우 중요함을 보이고 있다.  $\text{XeF}(\text{C} \rightarrow \text{A})$  레이저에 대한 동력학이 다른  $\text{RgX}$  엑시머에 비해 아직도 밝혀지지 않은 부분이 많아, 청록색 엑시머의 흡수반응에 대한 속도정수는 Nighan 등<sup>[2]</sup>, Brashears와 Setser<sup>[19]</sup>, Sauerbrey 등<sup>[20]</sup>에 의한 몇몇 보고가 있으나 크게 3가지 종류에 한정되고 있다. 그림 9는  $\text{Ar}^{**}$ ,  $\text{Xe}^{**}$ ,  $\text{Ar}_2^+$ 에 의한 청록색 파장대역의 흡수경로를 계산한 것이다. 이때 청록색영역(450~530 nm)에 대한 흡수계수는 Nachshon 등<sup>[54]</sup>이 사용한 값을 사용하였다.  $\text{F}_2$  양이 증가하면서  $\text{Xe}^{**}$ 는 급격한 감소를 보이고 있는데, 이것은 표 2에 보인 반응정수들에서 나타나듯이  $\text{Xe}^{**} + \text{F}_2$ 의 중성반응이  $\text{XeF}^*(B)$ 를 생성하는 비율이 높아  $\text{F}_2$  양이 증가함에 따라  $\text{Xe}^{**}$ 의 수밀도가 감소하는 것으로 해석된다. 본 시뮬레이션 모델에서는 할로겐 도우너로써  $\text{F}_2$ 만을 사용하였으나  $\text{NF}_3$ 를 사용하므로써 청록색 파장대역에서의 흡수를 줄일 수 있음을 보고<sup>[2]</sup>한 연구도 있다.

그림 10은  $\text{F}_2$ 의 양을 최적치인 3.5 Torr에 고정하고 Xe의 압력변화에 대한  $\text{XeF}^*(\text{C})$  형성경로를 계산한 것으로 그림 7과 같은 방법으로 보인 것이다. 이 때 역시

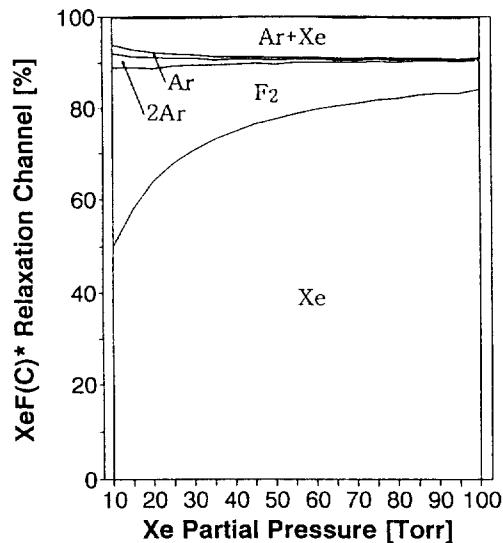


그림 11. Calculated  $\text{XeF}^*(\text{C})$  relaxation channels as a function of Xe partial pressure. Mixture gas condition is the same as figure 10. The excitation rate is about  $1 \text{ MW/cm}^3$ .

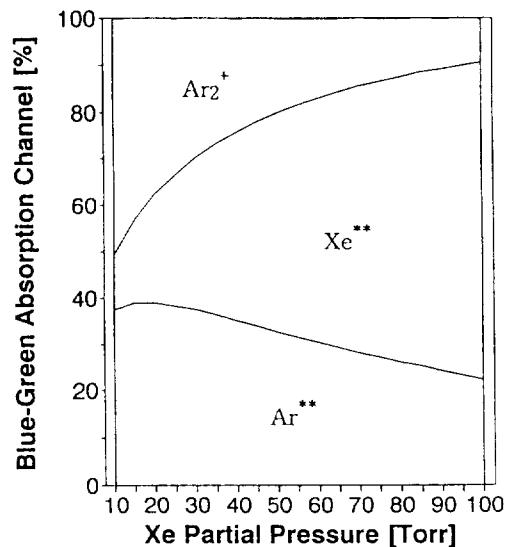


그림 12. Calculated blue-green absorption channels as a function of Xe partial pressure. Mixture gas condition is the same as figure 10. The excitation rate is about  $1 \text{ MW/cm}^3$ .

가스 매질은 대기압으로 일정하게 하였다. Xe 압력이 증가함에 따라  $\text{XeF}^*(B)$ 와의 충돌혼합에 의한  $\text{XeF}^*(\text{C})$  형성은 90%이상에 달하며 Ar에 의한 충돌혼합은 감소

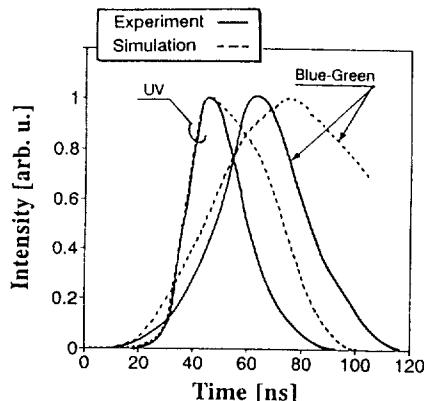


그림 13. Comparison of XeF( $C \rightarrow A$ ) and XeF( $B \rightarrow X$ ) lasers between simulation and experiment at atmospheric pressure of  $Xe/F_2/Ar = 40/3.5/716.5$  Torr. All of the four curves is normalized. The excitation rate is about  $1\text{ MW/cm}^3$ .

하는 것으로 나타났다. Ar 완충가스만의 혼합가스에서 보다 Kr을 첨가하므로써  $Kr^+$  이온과  $Kr^*$  원자에 의한 Xe으로의 에너지 전달반응으로  $Xe^+$  이온과  $Xe^*$  원자가 증가하여 XeF\*(C)의 형성이 탁월해 진다는 보고도 있다.  $F_2$ 에 의한 XeF\*(C) 형성의 속도정수는  $2.4 \times 10^{11} \text{ cm}^3/\text{s}$  이지만  $F_2$ 의 함유량이 0.5% 미만이므로 XeF\*(C) 형성에는 기여도가 매우 작은 것으로 나타났다. 그림 11은 그림 10과 시뮬레이션 조건을 동일하게 하고 XeF\*(C) 완화경로를 계산한 것이다. Xe 농도가 증가함에 따라 Xe 및  $F_2$ 에 의한 XeF\*(C)가 완화되는 비율은 각각 증가 및 감소로 나타났고, 이와같은 현상은 그림 8의 경우와 매우 상반되는 것을 볼 수 있다. Xe 및 Ar과의 2체 충돌과는 달리 Ar+Xe과 같은 3체 충돌에 의한 완화반응은 거의 Xe 및  $F_2$ 의 압력에 무관한 비율로 나타났다. 그림 12는 Xe 압력변화에 대한 청록색 광장대역에서의 흡수를 계산한 경로를 나타낸 것이다. 시뮬레이션 조건은 역시 그림 10과 동일하다. Xe 압력이 증가함에 따라  $Ar^{**}$ 와  $Ar_2^+$ 에 비해 Xe $^{**}$  원자의 흡수도는 매우 커져, 최적화된 Xe 압력 40 Torr일 때에 비해 Xe 70 Torr에서 약 2배 가까운 흡수를 보이고 있다.

한편, 대기압이하의 레이저 매질을 사용하는 것은 고압력 매질의 사용으로 야기되는 광학적 비선형성 문제<sup>[66]</sup>를 줄일 수 있다는 보고가 있다. 이러한 관점에서 ArF<sup>[67]</sup> KrF<sup>[68,69]</sup>는 대기압이하에서 동작특성이 보고되었다. 여기서 대기압 XeF( $C \rightarrow A$ )의 레이저의 특성을 관찰하기 위해 매질의 조건을 그림 5의 대기압  $Xe/F_2/Ar =$

$5.26/0.46/94.28\%$ 로 하였다. 그림 13은 XeF( $C \rightarrow A$ )와 XeF( $B \rightarrow X$ ) 레이저 평스파형을 실험에서 측정한 것(실선)과 시뮬레이션의 발진 조건에서 얻은 값(점선)을 함께 나타낸 것이다. 동일한 매질에서 동시에 발진되는 자외역 XeF( $B \rightarrow X$ )와 청록색 XeF( $C \rightarrow A$ ) 레이저를 실험에서 측정하기 위해, 쌍색성거울(dichroic mirror)을 출력거울로 사용하였고 자외역과 청록색의 차단 필터를 각각 사용하여 광전관을 통해 오실로스코프로 관측했다.<sup>[70]</sup> 그림 13에 보인 것처럼 XeF( $C \rightarrow A$ ) 레이저가 XeF( $B \rightarrow X$ ) 보다 얼마간 지연(~16 ns)되어 나타나는데, 이것은 앞에서 설명된 바와 같이 C-상태의 형성 메카니즘이 B-상태와 다르기 때문이다. C-상태는 전자빔 에너지에 의해 직접적으로 형성되지 않고 B-상태의 진동완화와 B-C 상호간의 충돌혼합에 의해 형성된 후 레이저 천이가 발생되기 때문이다. C→A 천이가 B→X 천이보다 지연되는 현상은 Brashears와 Setser<sup>[19]</sup> 및 Sauerbrey 등<sup>[20]</sup>의 보고에서도 같은 양상으로 나타나고 있다. 그림 13에서 실험과 시뮬레이션 결과에 대한 평스파형의 오차는 시뮬레이션 모델 설정에서 가정한 전자빔 축적에너지와 공진기, 계산에 사용한 XeF\*(C) 상태의 소광 및 흡수반응 정수에 대한 오차에서 비롯된다고 생각한다.

## V. 결 론

전자빔으로 여기된  $Xe/F_2/Ar$  레이저 가스 매질에서의 반응들을 0차원으로 시뮬레이션하여 XeF( $C \rightarrow A$ ) 엑시머 레이저의 청록색 광장대역(450~530 nm)에서 레이저 출력특성에 대하여 가스혼합비 및 총압력의 함수관계를 조사하였다. 시뮬레이션의 결과는 레이저 가스 매질을 대기압과 고압력(2.5 기압)에 대하여 전자빔(21 kA, 70 ns [FWHM])여기 XeF( $C \rightarrow A$ ) 레이저실험과 비교하여 잘 일치하였다. 이때 대기압과 2.5 기압에 대한  $Xe/F_2/Ar$ 의 혼합비는 약  $5.26/0.46/94.28\%$ 과  $1.84/0.26/97.9\%$ 로 나타났고 이로써 설정한 모델의 유용성을 검증하였다. 이 시뮬레이션으로 상준위의 XeF\*(C) 형성경로, XeF\*(C) 완화경로, 청록색 광장대역의 흡수경로에 대해  $F_2$  할로겐 도우너와 Xe 압력을 각각 변화하며 각 경로에 기여하는 반응들에 대해 정성적인 해석을 하였다. 또한 대기압 매질에서도 XeF( $C \rightarrow A$ )레이저 평스가 XeF( $B \rightarrow X$ )에 비해 다소 지연되어 나타난 실험결과에 대해, 상준위의 C-상태 형성이 초기 전자 에너지에 의해 직접 생성되지 않고 오직 먼저 형성된 B-상태와의 충돌혼합을 경유해 생성됨을 시뮬레이션 결과로 보였다.

본 연구의 결과는 전자빔여기 XeF( $C \rightarrow A$ )와 XeF( $B$

→X) 레이저의 출력특성에 대한 적절한 해석이 되었고, 시뮬레이션 모델에서 얻은 정성적인 분석으로 대기압 레이저 특성해석 및 레이저의 고성능화 연구에 매우 중요한 자료가 될 것으로 기대된다.

### 감사의 글

본 연구는 과기처 '93 국제공동연구과제[93-I-0057]의 연구비 지원에 의해 수행되었으며, 연구가 진행되는 동안 귀중한 조언을 해주신 목원대학교의 이영우교수에게 감사드립니다.

### 참 고 문 헌

- [1] Th. Hofmann, T. E. Sharp, C. B. Dane, P. J. Wiessoff, W. L. Wilson, F. K. Tittel and G. Szabo, IEEE J. Quantum Electron., **QE-28**, 1366(1992).
- [2] D. E. Klimek and A. Mandl, IEEE J. Quantum Electron., **QE-30**, 2929(1994).
- [3] H. -Y. Ryu, C. -H. Lee, Y. -W. Lee and Y. -P. Kim, in *Technical Digest of the Conference on Lasers and Electro-Optics*(Optical Society of America, Washington, D.C., 1994), CFH6, p.425.
- [4] Y.-K. Cheng, S.-P. Yang, M.-X. Wang and Z.-G. Ma, Appl. Phys. Lett. **62**, 4(1993).
- [5] R. C. Sze, T. Sakai, M. Vannini and M. L. Sentis, IEEE J. Quantum Electron., **QE-27**, 77(1991).
- [6] R. E. Beverly III, Appl. Phys. **B56**, 147(1993).
- [7] W. L. Nighan and M. C. Fowler, IEEE J. Quantum Electron., **QE-25**, 791(1989).
- [8] R. Burnham and N. W. Harris, J. Chem. Phys. **66**, 2742(1977).
- [9] D. Kligler, H. H. Nakano, D. L. Huestis, W. K. Bischel, R. M. Hill, and C. K. Rhodes, Appl. Phys. Lett., **33**, 39(1978).
- [10] H. C. Brashears, Jr. and D. W. Setser, Appl. Phys. Lett. **33**, 821(1978).
- [11] T. G. Finn, L. J. Palumbo and L. F. Champagne, Appl. Phys. Lett. **33**, 148(1978).
- [12] W. K. Bischel, H. H. Nakano, D. J. Ecksrom, R. M. Hill, D. L. Huestis and D. C. Lorents, Appl. Phys. Lett., **34**, 565(1979).
- [13] C. H. Fisher and R. E. Center, J. Chem. Phys. **69**, 2011(1982).
- [14] R. Burnham, Appl. Phys. Lett., **35**, 48(1979).
- [15] W. E. Ernst and F. K. Tittel, Appl. Phys. Lett., **35**, 36(1979).
- [16] F. Kannari, A. Suda, M. Obara and T. Fujioka, IEEE J. Quantum Electron., **QE-19**, 1587(1983).
- [17] F. Kannari, M. Obara and T. Fujioka, J. Appl. Phys. **57**, 4309(1985).
- [18] C. A. Brau, "Rare gas halide lasers" in *Excimer Lasers*, Edited by C. K. Rhodes, (Springer-Verlag, Berlin, 1984).
- [19] H. C. Brashears and D. W. Setser, J. Chem. Phys. **76**, 4932(1982).
- [20] R. Sauvrebrey, W. Walter, F. K. Tittel and W. L. Wilson, Jr., J. Chem. Phys. **78**, 735(1983).
- [21] J. H. Johnson, L. J. Palumbo and A. M. Hunter, II, J. Quantum Electron. **QE-15**, 289(1979).
- [22] 류한용, 이주희, 김용평, 경희대학교 레이저공학연구소 레이저공학 **3**, 33(1992).
- [23] J. M. Hoffmann and J. B. Moreno, Sandia National Laboratory report, SAND80-1486, (1980), (unpublished).
- [24] L. G. Christophorou, *Atomic and Molecular Radiation Physics*, Ch. 2 (John Wiley & Sons, New York, 1970).
- [25] D. C. Lorents, Physica **82C**, 19(1976).
- [26] "Conceptional design of a KrF scaling module," final report by MSNW Incorporated, Contract DE-ACO(079DP0115), (1980), (unpublished).
- [27] D. W. Trainor and J. H. Jacob, Appl. Phys. Lett. **35**, 920(1977).
- [28] T. H. Johnson and R. M. Hunter, J. Appl. Phys. **51**, 06(1980).
- [29] N. Nishida, T. Takashima, F. K. Tittel, F. Kannari, M. Obara, J. Appl. Phys. **67**, 3932(1990).
- [30] J. K. Rice and A. W. Johnson, J. Chem. Phys. **63**, 5235(1979).
- [31] B. E. Cherrington, *Gaseous Electronics and Gas Lasers*, (Pergamon, Oxford, 1979).
- [32] J. B. Laudenslager, "Ion-molecule processes in lasers", *Kinetics of Ion-Molecule Reactions*, Edited by P. Ausloos, (Plenum, New York, 1979).
- [33] P. K. Leichner and R. J. Ericson, Phys. Rev. A, **9**, 251(1974).
- [34] Analogous to  $\text{Ne}^+ + \text{Xe} + \text{Ne} \rightarrow \text{NeXe}^+ + \text{Ne}$ . L. A. Levin, S. E. Moody, E. L. Klosterman, R. E. Center and J. J. Ewing, IEEE J. Quantum Electron., vol. **QE-17**, 2282(1981).
- [35] J. Bokor and C. K. Rhodes, J. Chem. Phys., **73**, 2626(1980).
- [36] S. J. J. Nagalingam and G. H. Miley, presented at Topical Meeting, on Excimer Lasers, Charles-

- ton, South Carolina (1979).
- [37] H. L. Kramer, J. A. Herce and E. E. Muschitz, Jr., *J. Chem. Phys.* **56**, 4166(1972).
- [38] J. N. Bardsley and M. A. Biondi, *Advances in Atomic and Molecular Physics*, D. R. Bates and J. Esteman, Eds., New York (Academic Press, 1970).
- [39] H. J. Osakam and V. R. Mittelstadt, *Phys. Rev.* **132**, 1455(1963).
- [40] W. K. Bischel, D. J. Eckstrom, H. C. Walker, Jr. and R. A. Tilton, *J. Appl. Phys.*, **52**, 4429(1981).
- [41] M. Rokni, J. H. Jacob, J. A. Mangano and R. Brochu, *Appl. Phys. Lett.* **30**, 458(1977).
- [42] J. G. Eden and R. W. Waynant, *J. Chem. Phys.*, **69**, 134(1978).
- [43] W. Walter, R. Sauerbrey, F. K. Tittel and W. L. Wilson, Jr., *Appl. Phys. Lett.*, **41**, 387(1982).
- [44] R. Sauerbrey, W. Walter, F. Tittel and W. L. Wilson, *J. Chem. Phys.* **78**, 735(1983).
- [45] C. H. Chen, M. G. Payne and J. P. Judish, *J. Chem. Phys.* **69**, 1626(1978).
- [46] J. E. Velazco, J. H. Kolts and D. W. Setser, *J. Chem. Phys.* **65**, 3468(1976).
- [47] Analogous to  $Xe^* + F_2 \rightarrow XeF^* + F$ .
- [48] Estimated from  $Ar_2^*$ , C. H. Chen, M. G. Payne and J. P. Judish, *J. Chem. Phys.* **69**, 1626(1978).
- [49] Analogous to  $Xe_2^* + F_2 \rightarrow XeF^* + Xe + F$ .
- [50] Analogous to  $Xe_2^* + F_2 \rightarrow Xe_2F^* + F$ .
- [51] N. Boewering, R. Sauerbrey and H. Langhof, *J. Chem. Phys.* **76**, 3524(1982).
- [52] D. L. Huestis, R. M. Hill, H. H. Nakano and D. C. Lorents, *J. Chem. Phys.* **69**, 5133(1978).
- [53] M. Rokni, J. H. Jacob, J. A. Mangano and R. Brochu, *Appl. Phys. Lett.* **31**, 79(1977).
- [54] Y. Nachshon, F. K. Tittel and W. L. Wilson, Jr., *J. Appl. Phys.* **56**, 36(1984).
- [55] J. Tellinghuisen and P. C. Tellinghuisen, *J. Chem. Phys.* **68**, 5177(1978).
- [56] G. Marowsky, G. P. Glass, F. K. Tittel, K. Hohla, W. L. Wilson, Jr. and H. Weber, *IEEE J. Quantum Electron.*, **QE-18**, 898(1982).
- [57] D. W. Trainor, J. H. Jacob and M. Rokni, *J. Chem. Phys.*, **72**, 3646(1980).
- [58] J. G. Eden and R. W. Waynant, *Opt. Lett.* **2**, 13 (1978).
- [59] K. J. McCann and M. R. Flannery, *Appl. Phys. Lett.* **31**, 599(1977).
- [60] Estimated from  $Ar_2^+$ , see [33].
- [61] W. R. Wadt, *J. Chem. Phys.*, **73**, 3915(1980).
- [62] R. A. Sauerbrey, *IEEE J. Quantum Electron.*, **QE-23**, 5(1987).
- [63] R. K. Steunenberg and R. C. Vogel, *J. Am. Chem. Soc.* **78**, 901(1956).
- [64] A. Mandl, *Phys. Rev.* **A3**, 251(1971).
- [65] 류한용, 이주희, 김용평, 한국광학회지, **5**, 386(1994).
- [66] S. F. Fulghum, D. W. Trainor and C. H. Appel, *IEEE J. Quantum Electron.*, **QE-25**, 955(1989).
- [67] Y. W. Lee, H. Kumagai, Shu-ichi Ashidate and M. Obara, *Appl. Phys. Lett.* **52**, 1294(1988).
- [68] A. Suda, H. Kumagai and M. Obara, *Appl. Phys. Lett.* **51**, 218(1987).
- [69] Y. W. Lee, J. Jethwa, A. Endoh and F. P. Schafer, *Opt. Comm.* **94**, 546(1992).
- [70] 류한용, 이주희, (한국광학회지) 투고중)

### Simulation Analysis on the Output Characteristics of XeF(C→A) Excimer Laser Pumped by Electron-Beam

Han-Yong Ryu and Choo Hie Lee

*Deartment of Electronic Engineering, Kyung Hee University Yongin, Kyungki 449-701, Korea*

(Received: April 11, 1995)

By the use of computer simulation including collisional mixing kinetic processes of the *B*- and *C*-state in the upper laser level the output characteristics of electron-beam pumped XeF(C→A) excimer laser are analyzed. We compared the results between experiments and simulations for the XeF\*(*B*) formation that correlated the number of densities of the XeF\*(*B*). We obtained good agreement(28.5 mJ ± 5%) with comparisons between experiment and simulation and confirmed the optimal gas mixing ratio of  $Xe/F_2/Ar = 5.26/0.46/94.28\%$  at atmospheric pressure laser medium under the condition of 70 ns [FWHM] electron-beam (800 kV, 21 kA). Also through the simulation we have investigated that the XeF\*(*C*) formation channel, the XeF\*(*C*) relaxation channel, and the absorption channel of blue-green wavelength region as a function of  $F_2$  halogen donor and Xe partial pressure.