

볼츠만 방정식을 이용한 Xe 가스의 전자 이동속도 해석

The analysis of the electron drift velocity of Xenon gas by Boltzmann-equation

송병두*, 하성철*, 전병훈**

(Byoung-Doo, Song* Sung-Chul, Ha* Byoung-Hoon, Jeon**)

Abstract

This paper describes the information for quantitative simulation of weakly ionized plasma. We must grasp the meaning of the plasma state condition to utilize engineering application and to understand materials of plasma state. In this paper, the drift velocity of electron in Xenon gas calculated for range of E/N values from 0.01~500[Td] at the temperature is 300[°K] and pressure is 1[Torr], using a set of electron collision cross sections determined by the authors and the values of drift velocity of electrons are obtained for TOF, PT, SST sampling method of Backward Prolongation by two term approximation Boltzmann equation method. it has also been used to predict swarm parameter using the values of cross section as input. The result of Boltzmann equation, the drift velocity of electrons, has been compared with experimental data by L. S. Frost and A. V. Phelps for a range of E/N. The swarm parameter from the study are expected to server as a critical test of current theories of low energy scattering by atoms and molecules.

Key Wards : TOFT(Time of Flight), PT(Pulsed Townsend), SST(Steady State Townsend),
NDC(Negative Differential Conductivity)

1. 서론

크세논 가스를 충전한 방전관에 고전압을 가하게 되면 크세논 가스가 이온화되어 에너지 방전을 일으키게되므로 강력한 섬광을 얻을 수 있다. 따라서 스트로보스코프와 속사전에 필요한 빔처럼 강하고 짧은 섬광을 만드는 램프에 쓰인다. 저압에서 크세논 기체에 전기를 흐르게 하면 푸른색을 띤 백색광이 방출되며, 고압에서는 햇빛과 같은 백색광을 방출한다. 이러한 플라즈마 현상을 이용한 PDP(Plasma Display Panel)는 브라운관의 후대를 이어갈 차세대

디스플레이로 각광을 받고 있는 평판 표시 장치로 네온과 크세논을 밀봉한 뒤 전압을 가하여 발광을 일으켜 이 발광을 디스플레이에 이용한다. 크세논 섬광 등은 루비 레이저를 활성화시키는 데도 쓰인다.

이러한 기체의 특성을 해석하기 위해서는 전자이동속도, 전리계수, 부착계수, 실효전리계수, 종·횡축 확산계수, 평균에너지, 전자에너지분포함수를 파악하는 것이 상당히 중요하다. 이러한 연구는 초기에 H. Itoh, T. Musha, Thomas에 의해 연구되었는데 이것은 방전공간내에서 나타나는 전체의 전자를 추적하여 전자이동속도 등 전자군 파라미터의 동향을 조사하여 이들 전자의 물리량을 가상적으로 샘플링(Sampling)하고 그들 하전입자의 운동을 전자계산기로 계산하여 전자군 파라미터의 특성을 확률적으로 결정하는 것이다.^[1]

* 동국대학교 전기공학과
(서울시 중구 필동 동국대학교,
Fax: 02) 2260-3348
E-mail : peter@dgu.edu)
** 중부대학교

본 논문에서는 저온플라즈마에 이용되는 크세논의 특성을 파악하기 위한 목적으로 $E/N=0.01\sim 500[\text{Td}]$ 범위, 압력 $1[\text{Torr}]$, 온도 $300[\text{°K}]$ 에서 볼츠만 방정식의 2항 근사법에 의한 Backward Prolongation^[2]을 세 가지 샘플링에 의하여 시뮬레이션하고 그 결과를 L. S. Frost and A. V. Phelps^[3]의 결과와 비교 검토하였다.

2. 볼츠만 방정식 법

2.1 볼츠만 방정식

기체중의 방전현상을 원자론적인 입장에서 보면, 상호충돌을 되풀이하는 하전입자 즉 전자, 원자, 분자, 이온에서 성립되며, 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.

전자군의 임의의 위치와 속도 및 시간의 함수인 전자수 밀도는 위치변화에 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.

2.2 샘플링 방법

기체 중에서 운동하고 있는 전자군 Parameter를 관측하는 방법으로는

- ① Time of Flight
 - ② Pulsed Townsend
 - ③ Steady State Townsend
- 등이 있다.^[4]

본 논문에서는 데이터 샘플링을 이들의 관측법에 따라서 행한다. 3종의 관측법 중 PT, SST에서는 각각 시간 및 위치를 지정할 뿐이므로 계산을 행한 전자수가 그대로 샘플수로 되어 얻어지지만, TOF에서는 위치와 시간을 함께 지정하기 때문에 샘플 수는 점점 적게되어 통계적인 변동을 많이 포함한 결과가 되기 쉽다. 반면에 전자수를 많이 잡으면 계산시간도 이것에 비례하여 증가한다.

2.2.1 TOF 샘플링 방법

TOF법은 하전입자의 성장을 위치와 시간의 함수로써 파악하는 관측법으로 입자수 비보전의 경우에도 전자군의 성질을 정확하게 구할 수 있는 장점들

가지고 있다. 시간 t_k 에 대한 전자의 위치별 밀도, 에너지, 속도 등에 대한 Data에서 Swarm Parameter를 구하는 TOF 관측법에서는 실제의 공간에 있어서도 전자이동속도, 확산계수 등을 얻을 수 있다.

2.2.2 PT 샘플링 방법

전자군의 성질을 구성입자의 위치와 관계없이 시간만의 함수로써 파악하는 PT법에서는 시간 t_k 에 있어서 전공간에 존재하는 M_k 개의 전자에 대해서 속도, 에너지가 샘플링 되어, 속도공간에서 표현되는 파라미터를 구할 수 있다.

2.2.3 SST 샘플링 방법

평행평판전극의 음극에 외부로부터 자외선 등의 방법에 의하여 연속적인 초기전자를 공급하여 전극내에 정상입자의 흐름을 형성시킨 후에 전극의 길이만의 함수로써 Swarm Parameter를 구하는 방법이다.

3. 전자 충돌 단면적

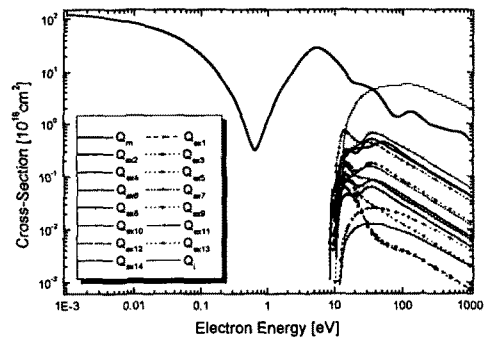


그림 1. Xe 기체의 전자 충돌 단면적

Fig. 1. The collision cross section of electrons in Xe gas

전자의 특성을 파악하는 기초로 자료로써 전자충돌단면적은 상당히 중요하다. 본 논문에서 사용한 Xe 기체의 전자충돌단면적(그림 1)에 나타내었다. Xe 기체의 운동량변환단면적(Qm)을 $0.001\sim 1000[\text{eV}]$ 에서 추정된 결과를 보고한다. 이것은 Xe 기체의 Qm에서 Ramsauer Minimum 및 피크값을 포함한 것이다. Xe 기체의 Qm에서 현재 관심을 갖는 것은 Ramsauer Minimum이 어느 [eV] 정도에서

존재하고, 또한 그것이 어느 정도의 값을 갖는가 하는 점이다. Xe 기체의 운동량변환단면적은 0.1~5[eV]에서 깊은 Ramsauer Minimum을 갖는다. 해석에 이용한 Xe의 전자충돌단면적은 운동량변환단면적(Qm), 전자여기단면적(Qex), 전리단면적(Qi)의 3종류이다. 단, 전자여기단면적(Qex)에 관해서는 총 14개의 단면적이 있다.

특히 여러 단면적 중에서 절연기체에 관련된 전리와 부착, 에칭에 관련된 여기와 해리단면적은 충돌단면적 중에서고 상당히 중요하다.^[5]

4. 결과 및 고찰

4.1 전자 이동 속도 (W)

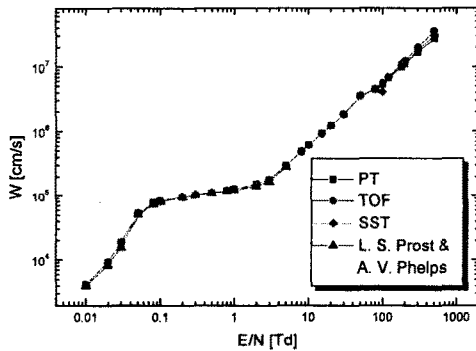


그림 2. Xe 기체의 전하이동속도

Fig. 2. The drift velocity of electrons in Xe gas

[그림 2]의 전하이동속도는 E/N=0.01~500[Td]까지 압력 1[Torr], 온도 300[°K]에서 Xe의 시뮬레이션 결과를 L. S. Frost and A. V. Phelps의 결과와 비교한 것이다.

전하이동속도는 E/N[Td]에 따라 거의 선형적으로 증가하나 0.8~3[Td]에서는 증가율이 낮다. 보통 전자충돌단면적 중 운동량 변환 단면적에서 넓은 Ramsauer minimum을 가지는 기체는 전계[E/N]가 증가함에 따라 이동속도가 감소하는 부구배(NDC)의 특성이 뚜렷이 나타나는 것이 보통이나 Xe 기체에서는 부구배 특성이 나타나지 않았다. 이는 Xe 기체의 운동량변환단면적은 0.1~5[eV]에서 깊은 Ramsauer Minimum을 갖지만 전자의 이동속도가 감소할 만큼 기체분자와 충돌하는 빈도가 크지 않았기 때문에 평균이동속도는 증가율이 낮아졌을 뿐 이동속도의 감소는 가져오지 않았다.

5. 결론

Xe 기체의 전자충돌단면적을 이용하여 0.01~500[Td] 범위에서 전자군 파라미터의 특성을 볼츠만 방정식에 의한 Backward Prolongation을 이용하여 세 가지 샘플링에 의하여 시뮬레이션 하여 이동속도를 구하였다. 그리고 이 계산치를 L. S. Frost and A. V. Phelps의 실험치와 비교 해석하여 산출된 값들이 정량적으로 거의 일치한 것을 확인하였고 논문에서 사용한 Xe의 전자충돌단면적의 타당성을 검증하였다. 또한 전자 이동속도의 해석결과 다음과 같은 결론을 얻었다.

1. Xe 기체의 운동량변환단면적(Qm)을 0.001~1000[eV]에서 추정된 결과 운동량변환단면적(Qm)이 저에너지 영역 특히 0.1~5[eV]에서 깊은 Ramsauer Minimum을 갖는 것을 알 수 있다.

2. Xe 기체의 전하이동속도(W)의 전체적인 변화는 상대 전계의 세기에 비례하며 전체 0.01~500[Td] 계산영역 중 L. S. Frost and A. V. Phelps의 결과치 0.01~5[Td] 영역에서 일치하였으며, 0.8~3[Td]에서는 증가율이 낮은 것은 Xe 기체의 이동속도에서는 부구배 특성이 나타나지는 않았으나 Xe 기체의 운동량 변환단면적은 0.1~5[eV]에서 깊은 Ramsauer Minimum을 갖기 때문에 평균 이동속도의 증가율이 낮아졌다.

이처럼 볼츠만 방정식 법은 그 결과값이 실험치와 거의 일치하는 우수한 프로그램이라는 것이 입증되므로써 비용 및 시간이 크게드는 실험을 하지 않고도 Xe 기체의 특성을 해석하는 것이 가능하다.

이러한 결과를 이용하여 반도체 박막공정, 에칭, Plasma CVD 및 PDP 등의 활용에 크게 기여할 것으로 판단된다.

참고 문헌

- [1] 森 正武, "Fortran 77 數値計算プログラミング", (岩波書店), pp. 41~44, 1995.
- [2] Philip. E. Luft, "Discription of a Backward Prolongation program for computing transport coefficients", JILA, information center report, No. 19, 1975
- [3] 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.
- [4] 氣體放電シミュレーション技法 (제140호), 1974.
- [5] 菅野卓雄. "半導體 プラズ마 프로세스技術, 産業圖書, pp. 38~50, 1993.