

2항근사 볼츠만 방정식을 이용한 Ne의 전자수송계수 연구

전병훈, 하성철*, 송병두*
 중부대학교, 동국대학교*

The study on the electron transport coefficients in Neon gas
 by 2-term approximation of the Boltzmann Equation

Byoung-Hoon Jeon, Sung-Chul Ha*, Byoung-Doo Song*
 Joongbu Univ., Dongguk Univ.*

Abstract - The electron transport coefficients, the electron drift velocity W , the longitudinal diffusion coefficient ND_L and D_L/μ , in pure Ne were calculated over the wide E/N range from 0.01 to 800 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 Ne molecular gas.

속도와 종축확산계수를 2항근사 볼츠만 방정식을 이용하여 계산하고 해석하고 있다.

2. 본 론

2.1 볼츠만 2항근사 방정식

기체 중에서 하전입자군의 수송계수를 측정하는 방법에는 2항근사와 다항근사 볼츠만 방정식 해법[5]과 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, 통계 시간이 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 에너지 분포를 구할 때 샘플 수는 차츰 적어져 통계적 변동을 다수 포함한 결과로 되기 쉽다. 전자 수를 많이 택하면 전자계산기의 계산시간도 그에 비례하여 증가하므로 이것을 보완하기 위하여 순수한 관측 법에서의 차이를 지정하는 영역에서 어느 정도의 폭을 갖게 한다. TOF 샘플링법으로 방전공간의 전자 이동속도, 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.

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

전자군의 중심이동속도 W 는 다음과 같다.

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

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

1. 서 론

저압가스 속의 글로 방전을 이용한 방전등에 주로 사용하는 Ne분자가스는 PDP (Plasma Display Panel)의 형광 방전 램프로, Xe가스와 혼합가스의 모체가스로 이용되고 있고[1], 현재의 PDP가 가지고 있는 발광 효율, 고압 동작, 고비용 등의 단점을 개선하기 위한 노력이 계속되고 있다.[2] 가스 혼합에 따른 특성연구는 셀 소자의 발광특성, 명암도 및 잔상, 출력 및 발광효율을 개선하는데 필수적 연구이며, 이는 직접적인 실험을 통한 시간적 소모보다 시뮬레이션에 의한 가스들의 특성을 파악함이 경제적이며 효율적이다. 우선 개개의 가스들이 가지고 있는 특성을 해석하기 위해서는 무엇보다도 그 가스가 가지고 있는 정확한 전자충돌단면적의 구성(데이터)을 알아야 하고, 전자이동속도, 종·횡방향확산계수, 전리, 부착 및 실효전리계수, 평균에너지, 전자에너지분포함수 등 전자수송계수들을 해석하는 것이 상당히 중요하다. 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 희가스와 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 Itoh와 Musha[3], Thomas [4]에 의해 연구되었는데 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 논문에서는 전자군 방법을 이용하여 Ne분자가스의 정확한 전자충돌단면적의 결정과 순수 Ne분자가스에서의 전자수송계수의 정확한 물성적 해석을 위하여, 0.01~800 Td에 이르는 광범위한 E/N 범위에서 전자이동

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

한편, 횡방향확산계수 D_T 는 전계와 직각방향의 위치 분산으로 다음과 같이 표현하고, 시간에 대한 기호기로 구한다.

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

여기서 r_j 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.

2.2 Ne분자가스의 전자충돌단면적

그림 1은 본 연구에 사용된 Ne분자가스의 전자충돌단면적이다. 전자충돌단면적은 전자의 특성을 파악하는 중요한 기초 자료이며, 그림에 나타난 바와 같이 운동량단면적 Q_m 과 여기단면적 Q_{ex} , 전리단면적 Q_i 로 구성되어 있다. 같은 비활성기체에 속하는 Ar원자가스와 Xe분자가스의 Q_m 에는 Ramsauer Townsend Minimum (RTM)이 존재하는 것이 확인되었으나 Ne 분자가스에서는 He가스와 같이 Q_m 에 RTM이 존재하지 않는 것을 알 수 있다.[6]

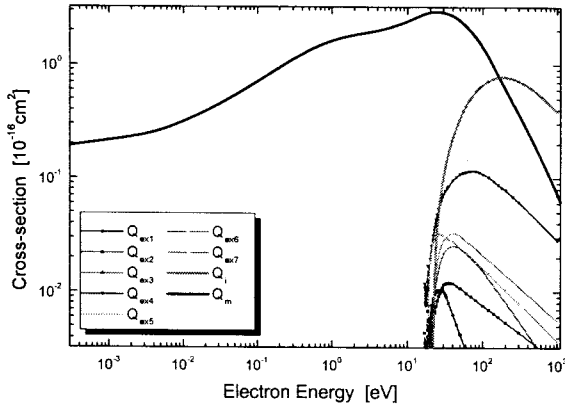


그림 1. Ne분자가스의 전자충돌단면적

Fig. 1. The set of electron collision cross section for Ne molecular gas

2.3 결과 및 고찰

2.3.1 전자기동속도

그림 2는 Ne분자가스의 전자기동속도를 2항근사 볼츠만 방정식을 이용하여 계산한 결과와 A. G. Robertson [7]의 실험결과를 E/N [Td]의 변화에 따라 비교하여 나타낸 것이다. 볼츠만 방정식을 이용한 결과는 온도 $T=300$ [K]에서 계산된 것이며, A. G. Robertson의 실험 결과는 $T=297$ [K]에서 측정된 것이다. 그림 2에 나타난 바와 같이 Ne 분자가스의 전자기동속도는 E/N 값의 증가에 따라 서서히 증가하다가 2.5[Td]부터 급격히 증가하는 것을 볼 수 있다. 이는 $E/N \leq 2.5$ [Td]이하 범위에서 Ne분자가스가 가지고 있는 운동량변환단면적 (Q_m)에 전적으로 의존하는 것으로 사료되며, 이후 $E/N=2.5$ [Td]를 기점으로 급격히 증가한 것은 약 20 [eV]범위에 산재하여 있는 여기단면적(Q_{ex})의 영향을 받기 시작하여 전자의 이동이 증가한 것으로 판단된다. 2항근사 볼츠만 방정식을 이용하여 산출된 Ne분자가스와 A. G. Robertson

[7]의 실험결과를 잘 일치하며 가스의 온도 의존성을 보여주고 있다.

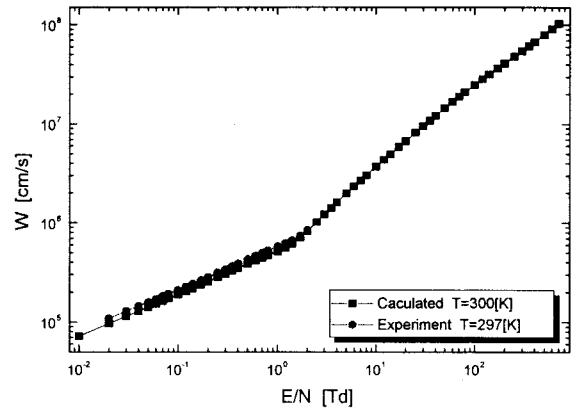


그림 2. Ne분자가스의 전자기동속도

Fig. 2. The electron drift velocity in Ne molecular gas

2.3.2 종·횡방향확산계수

그림 3은 Ne 분자가스의 종·방향확산계수와 횡방향확산계수를 전자수밀도와의 곱하여 E/N 함수로 동시에 나타낸 것이다. Ne 분자가스의 종방향확산계수는 Ne가스가 가지고 있는 운동량 변환 단면적의 Ramsauer Townsend Minimum (RTM)이 존재하지 않는 데도 불구하고 E/N 에 따라 지속적으로 증가하다가 약 2 [Td] 이상의 E/N 범위에서 높은 파고 형태의 부구배 (Negative Differential Conductivity, NDC) 현상이 나타났다.[8][9]

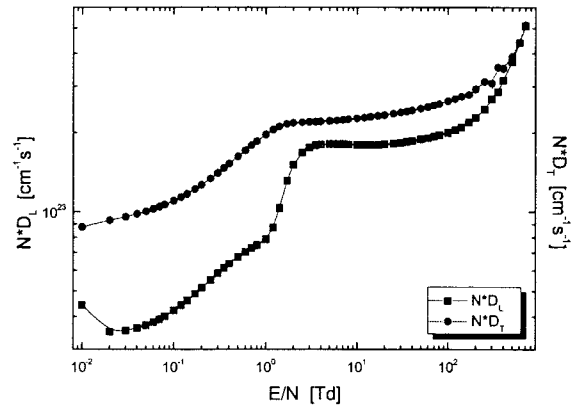


그림 3. Ne분자가스에서의 종·횡방향확산계수와 분자수 밀도와 곱

Fig. 3. The product of the gas number density and the longitudinal and transverse diffusion coefficients in Ne molecular gas

하지만 횡방향확산계수는 2[Td] 이후부터 종방향계수만큼의 급격한 부구배현상은 아니지만 미소적인 현상이 보이고 있다. 전자기동속도의 결과에서 보이는 완만한 형태가 아닌 파고형의 뚜렷한 현상이 나타나는 것은 약 2 [Td] 이상의 E/N 범위는 Ne 분자가스의 여기 단면적이 시작되는 약 20 [eV]에 해당되며 그 기점에서 운동량 변환단면적과 여기단면적의 충돌에 의해 이러한 현상이 보인다고 사료되는 바이다.

2.3.3 종·횡방향 특성에너지

그림 4는 Ne 분자가스의 종방향확산계수와 횡방향확산계수를 이동도의 비율로 나눈 특성에너지를 E/N 합수로 나타낸 것이다. Ne 분자가스의 특성에너지는 전체적으로 E/N 증가에 따라 급격한 증가를 보여주고 있으며, 종방향의 경우는 E/N=5 [Td] 이상에서 횡방향의 경우는 E/N=1.5 [Td] 이상에서 부구배(NDC) 현상이 보여주고 있다.

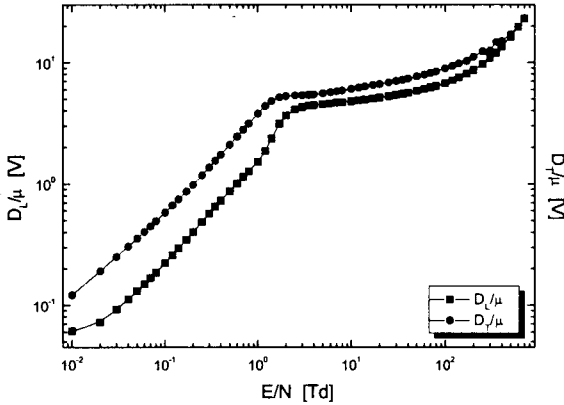


그림 4. Ne분자가스의 종·횡방향 특성에너지
Fig. 4. The longitudinal and transverse characteristic energy in Ne molecular gas

2.3.4 전리계수

그림 5는 Ne 분자가스의 전리계수를 나타낸 것이다. 전자가 전계 중에서 가속되어 전자의 운동에너지가 기체의 전리에너지를 넘으면 어떤 전리확률을 가지고 기체 분자에서 전리된다. 그림에 나타난 바와 같이 Ne 분자 가스의 전자는 E/N=2 [Td]에서 전리를 일으키기 시작하여 급격히 증가하였으나 높은 E/N [Td] 영역에서는 거의 일정한 경향을 나타내었다. 이와 같은 현상은 전자의 에너지가 증가하면 충돌할 때에 상호 작용하는 시간이 너무 짧기 때문에 전리하기 어렵기 때문이다.

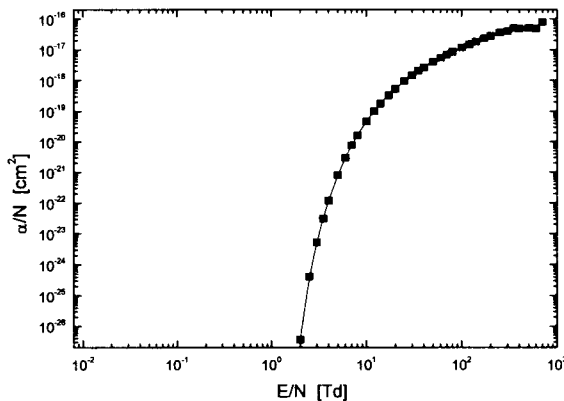


그림 5. Ne분자가스의 전리계수
Fig. 5. The ionization coefficients in Ne molecular gas

3. 결 론

차세대 디스플레이 패널의 제조 공정에 사용되는 가스의 특성연구를 통하여 현재의 PDP가 가지고 있는 발광 효율, 고압 동작, 고비용 등의 단점을 개선하기 위해 필

요한 Ne분자가스의 전자충돌단면적의 정확한 데이터와 그 데이터를 가지고 온도 300[K], 압력 1[Torr], E/N=0.01~800 [Td]의 범위에서 2항근사 볼츠만방정식을 이용한 전자수송계수의 값들을 해석하였다. 아직 여러 가지 각도에서의 해석이 필요하지만, Ne분자가스의 전자수송계수들의 결과로부터 E/N값의 증가에 따른 부구배 현상이 나타나고, 특히 전자이동속도의 결과로부터 온도 의존성이 있음을 시사하였다.

[참 고 문 헌]

- [1] X. Shi and P. D. Burrow, "Differential scattering cross section of Neon at low electron energies", J. Phys. B 25, pp. 4273-4279, 1992.
- [2] T. Kamegaya, H. Matsuzaki, "Basic Study on the Gas-Discharge Panel for Luminescent Color Display", IEEE Transaction on electron devices, Vol. ED-25, No. 9, Sep., 1978.
- [3] H. Itoh, and T. Musha, "Monte Carlo Calculations of Motion in Helium", J. Phys. Soc. Japan, Vol. 15, No. 9, pp. 1675-1680, 1960.
- [4] 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.
- [5] 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.
- [6] 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.
- [7] A. G. Robertson, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 5, 648, 1972
- [8] 송병두 외, "볼츠만 방정식을 이용한 Xe 가스의 전자이동 속도 해석", 한국전기전자재료학회 춘계학술대회논문집, pp. 201 -203, 2001.
- [9] Y. Nakamura and M. Kurachi, "Electron Transport Parameters in Argon and its momentum transfer cross section", J. Phys. D21, pp. 718-723, 1988.