

다항근사 및 2항근사 볼츠만 방정식을 이용한 CF₄+Ar 혼합기체의 전자이동속도 연구

송병두, 하성철, 전병훈*

동국대학교, 중부대학교*

The study of electron drift velocity in CF₄ +Ar molecular gas mixture by 2-term and multi-term approximation of the Boltzmann equation

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

Dongguk Univ., Joongbu Univ.*

Abstract

This paper describes the information for quantitative simulation of weakly ionized plasma. In previous paper, we calculated the electron transport coefficients in CF₄+Ar gas mixture by using two-term approximation of Boltzmann equation. but there is difference between the result of the two-term and the multi-term approximation of the Boltzmann equation in CF₄ gas. Therefore, in this paper, we calculated the electron drift velocity (W) in CF₄+Ar gas mixture for range of E/N values from 0.01~500[Td] at the temperature was 300[K] and pressure was 1[Torr] by 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 each other for a range of E/N.

Key Words : The two-term approximation of the Boltzmann equation, The multi-term approximation of the Boltzmann equation, E/N, W, Ar, CF₄

1. 서론

전자수송계수의 수치계산에 사용되는 볼츠만 방정식 기법으로는 2항 근사와 다항 근사 두 가지가 있으며 지금까지 이 두 가지 기법 중 계산에 소요되는 시간이 비교적 짧은 장점을 가진 간단한 2항 근사 기법을 사용하여 전자수송계수를 계산하여 왔다.

기존의 연구에서 다량의 Ar 원자가스를 혼합하여 주(主)가스의 전자수송계수 특성을 파악할 때, 거시적인 측면에서 탄성충돌단면적보다 비탄성충돌단면적이 작은 경우, 2항 근사 기법에 의한 전자수송계수의 계산 결과는 오차를 포함하고 있으나

무시할 정도로 작아 그 특성 해석에 타당한 방법으로 적용되어 왔다.

그러나 CF₄ 분자가스와 같이 비탄성이 큰 분자가스들은 비탄성충돌단면적(특히 진동여기단면적)의 지배적인 영향에 의해 전자의 속도분포에서 강한 비등방성이 나타나는 E/N영역이 존재하기 때문에 그동안 전자군 연구에 이용되었던 2항 근사 볼츠만 방정식의 해석으로는 정확한 전자수송계수를 얻기 어려운 것으로 보고되었다.[1] 또한 이러한 CF₄ 분자가스와 Ar 원자가스의 혼합의 경우 비탄성충돌단면적이 혼합가스의 특성에 어떠한 영향으로 나타나는가에 대한 연구의 필요성이 제기되었다.[2]

따라서 본 논문에서는 Robson and Ness[3]에 의해 연구된 다항근사 볼츠만 방정식과 2항 근사 볼츠만 방정식 해석법을 이용하여 E/N= 0.01~500[Td]범위, 압력=1[Torr], 온도=300[K]에서 순수 CF₄ 분자가스 및 1%, 5%, 10% CF₄+Ar 혼합가스의 전자이동속도를 계산하여 산출하고 그 결과를 서로 비교하여 두 해석법간의 차이점에 대하여 검토하였다.[4]

2. 볼츠만 방정식

2.1 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.[5]

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.

2.2 볼츠만 다항근사 방정식

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 구면조화

로 표현할 필요가 있다. 이에 Kumar[6]는 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 $l_{\max} > 2$ 일 때를 다항 근사라 하며, 이 다항 근사 기법은 Robson and Ness[3]에 의해 급진적으로 발전되어 전자속도분포함수를 Legendre와 Sonine 급수로 전개하였고, 전자수송계수들은 다양한 Legendre 다항식 l 과 Sonine 다항식 ν 에 의해 구하고 있다.

3. 전자충돌단면적

3.1 CF₄ 분자가스의 전자충돌단면적

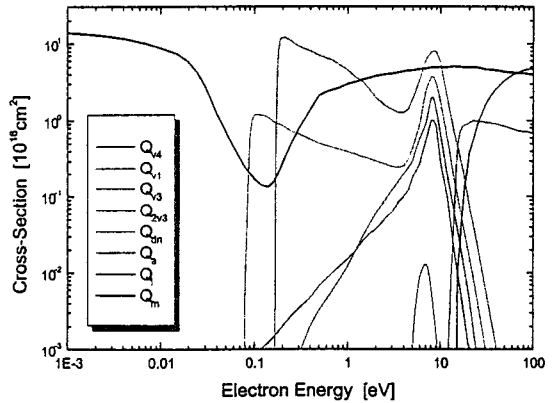


그림 1 CF₄ 분자가스의 전자충돌단면적

Fig. 1 The electron collision cross section set for CF₄ molecular gas

[그림 1]은 본 연구에 사용된 CF₄ 분자가스의 전자충돌단면적이다. CF₄ 분자가스의 전자충돌단면적은 그림에 나타난 바와 같이 운동량단면적(Q_m)과 해리단면적(Q_{dn}), 전리단면적(Q_i), 부착단면적(Q_a), 진동여기단면적(Q_{v1}, Q_{v2}, Q_{v3}, Q_{v4})으로 구성되어 있다. 여기서 진동여기단면적 중 Q_{v1}은 대칭신축모드, Q_{v3}는 비대칭신축모드, Q_{v4}는 비대칭신축변각모드, Q_{v2}는 Q_{v3}의 제2고조파이다.

CF₄ 분자가스의 운동량 변환단면적(Q_m)은 0.1~0.8[eV] 범위에서 Ramsauer Townsend Minimum

을 가지며 이 지점에 큰 진동여기단면적(Q_{v1} , Q_{2v3} , Q_{v3} , Q_{v4})이 존재하기 때문에 순수 상태에서 단면적을 결정하는 것은 어려움이 있다. 또한 진동여기 단면적의 피크치에 비교적 큰 부착단면적이 존재하여 이것이 전자부성특성을 나타내는 원인이 된다고 사료된다.

본 논문에서 사용된 CF_4 분자가스의 전자충돌 단면적은 Y. Hayashi와 Y. Nakaumra[7]의 결과를 이용하였다.

3.2 Ar 원자가스의 전자충돌 단면적

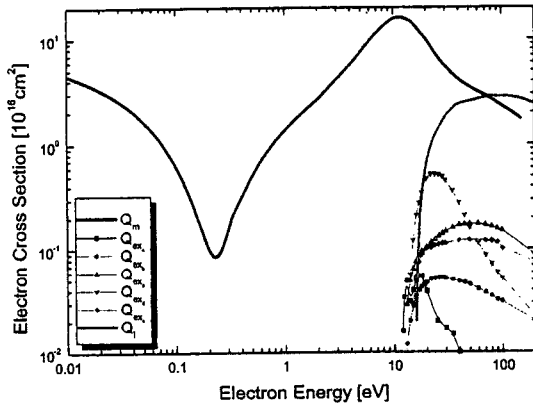


그림 2 Ar 원자가스의 전자충돌 단면적
Fig. 2 The electron collision cross section set for Ar atom gas

본 논문에서 이용된 Ar 원자가스의 전자충돌 단면적을 [그림 2]에 나타내었다. Ar 원자가스는 그림에서 나타난 바와 같이 저 에너지 영역 0.1~0.3[eV] 범위에서 Ramsauer Townsend Minimum (RTM)을 갖는 운동량변환단면적(Q_m)과 전리단면적(Q_i), 그리고 다수의 여기단면적(Q_{exa} , Q_{exb} , Q_{exc} , Q_{exd} , Q_{exe})으로 구성되어 있다.[8]

가스의 충돌단면적은 전자의 특성을 파악하는 기초 자료로서 상당히 중요하며, 각각의 단면적의 구조적 특성은 본 논문에서 이용한 2항 근사와 다항 근사 볼츠만 방정식의 적용에 있어서 어떤 관련이 있는지 알 수 있다.

4. 결과 및 고찰

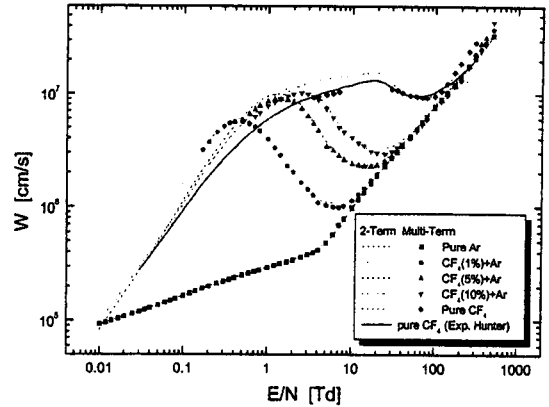


그림 3 $CF_4 + Ar$ 혼합가스의 전자이동속도 비교
Fig. 3 The comparison of electron drift velocities in $CF_4 + Ar$ gas mixture

[그림 3]은 2항근사 볼츠만 방정식과 다항근사 볼츠만 방정식을 이용하여 각각 1%, 5%, 10%의 CF_4 분자가스와 Ar 원자가스를 혼합한 혼합가스의 이동속도와 순수 CF_4 분자가스 및 순수 Ar 원자가스의 이동속도 결과를 비교하여 나타낸 것이다.

2항 근사 및 다항 근사 볼츠만 방정식 법을 이용하여 계산한 Ar 원자가스의 전자이동속도 결과는 서로 차이가 없는 것으로 확인되었으며, 2항 근사 볼츠만 방정식 기법으로 얻어진 결과가 아주 적은 오차를 수반하여 다항 근사 기법과 비교하여 신뢰할 수 있어, 복잡한 다항 근사 기법을 쓰지 않고도 2항 근사 기법으로도 충분히 결과를 얻을 수 있는 것을 알 수 있다.[9] 하지만, 순수 CF_4 분자가스의 전자이동속도는 2항 근사 볼츠만 방정식 이용한 수치계산 결과와 다항 근사 볼츠만 방정식 이용한 수치계산 결과사이에 큰 차이를 보이고 있다. 이는 CF_4 분자가스가 가지고 있는 탄성충돌 단면적인 운동량변환단면적보다 비탄성충돌 단면적인 진동여기단면적이 크게 영향을 미치기 때문에 CF_4 분자가스에서는 2항 근사 기법으로 얻어진 결과가 실험결과와 큰 차이를 나타내어 2항 근사 볼츠만 방정식 기법보다 다항 근사 기법이 정확한 전자이동속도를 산출할 수 있다는 사실을 알 수 있다.

따라서 운동량 변환 단면적에 커다란 RTM을 가지는 Ar 원자가스에 CF_4 분자가스를 혼합하여 전자이동속도를 계산할 경우 CF_4 분자가스의 비탄성충돌 단면적의 영향이 나타나는 것을 확인하였다.

그러므로 혼합비와 상관없이 10%, 5%의 CF_4+Ar 혼합가스에서 CF_4 분자가스의 함량이 극히 낮은 1%의 CF_4+Ar 혼합가스에 이르기까지 일부 구간에서 볼츠만 2항근사와 다항근사의 결과는 차이점을 나타내고 있다. 따라서 다량의 Ar 원자가스에 소량의 CF_4 분자가스를 혼합하여도, Ar 원자가스의 운동량변환단면적이 CF_4 분자가스와 같이 RTM을 가지고 있어, 혼합을 하여도 비탄성충돌단면적이 영향이 상대적으로 크게 나타나는 구간이 존재하여 혼합비와 상관없이 순수에서와는 달리 볼츠만 방정식 2항 근사 해석으로는 정확한 전자이동속도를 얻기 어려운 구간이 존재하는 것을 확인하였다. 또한 CF_4+Ar 혼합가스의 전자이동속도는 그림에서 나타난 바와같이 낮은 에너지 범위에서 비탄성충돌단면적의 영향으로 이동속도가 증가하였다가 다시 감소하는 부구배 (Negative Differential Conductivity, NDC) 현상이 넓은 구간에서 각각 나타났으며, 1%에서는 10[Td], 5%에서는 30[Td], 10%의 CF_4+Ar 혼합가스에서 50[Td] 부근에서 Ar 원자가스의 이동속도와 일치하는 것을 알 수 있다.

5. 결론

전자군 수치계산에 사용되는 2항 근사와 다항 근사 볼츠만 방정식 기법 중 계산이 간단한 2항 근사 볼츠만 방정식을 사용하여 왔으며, Ar 원자가스와 같이 낮은 에너지 범위에 탄성충돌단면적이 RTM의 유무와 상관없이 단독으로 존재할 경우 전자수송계수 산출에 적용한 기존의 2항 근사와 다항 근사 볼츠만 방정식 두 기법은 비탄성충돌의 영향으로 발생하는 근사법의 차이점이 크지 않아 2항 근사만으로도 충분히 신뢰할 수 있는 전자이동속도를 얻을 수 있었으나, CF_4 분자가스와 같이 비탄성충돌단면적(특히 진동여기단면적)이 지배적인 경우 볼츠만방정식의 2항 근사 해석으로는 정확한 전자이동속도를 얻기 어려운 것이 확인되었다. 또한, $CF_4 + Ar$ 혼합가스의 이동속도를 산출할 때에는 Ar 원자가스가 가지는 운동량변환단면적 RTM이 CF_4 분자가스와 같은 에너지 영역에서 존재하기 때문에, 혼합비율과 상관없이 CF_4 분자가스의 비탄성충돌단면적의 영향이 나타나는 것을 확인하였다. 따라서 전자군 수치계산에 2항근사와 다항근사 볼츠만 방정식 적용하는 경우, 혼합비

율과 상관없이 비탄성충돌단면적이 탄성충돌단면적에 비하여 얼마나 영향을 미치는가에 따라 적절한 방법을 선택할 필요가 있다.

참고 문헌

- [1] 전병훈, 하성철, "2항 근사 볼츠만 방정식을 이용한 CF_4 분자가스의 전자수송계수의 해석", 한국전기전자재료학회, 춘계학술대회, 29-32, 2001.
- [2] R. E. Robson and K. F. Ness, "Velocity distribution and transport coefficients of electron swarms in gases:...", Phys. Rev. A33, pp. 2068-2077, 1986.
- [3] S. R. Hunter, J. G. Carter and L. G. Christophorou, "Electron motion in the gases CF_4 , C_2F_6 , C_3F_8 , and $n-C_4F_{10}$ ", Phys. Rev. A, Vol 38, No. 1, pp. 58-69, 1988.
- [4] 林 勇一, 中村 義春, "電子 スウォーム法による CF_4 分子の低エネルギー電子衝突斷面續に關する研究", 慶應義塾大學大學院理工學研究科 電氣工學專攻 碩士學位論文, 1997.
- [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] Kailash Kumar, "Matrix Elements of the Boltzmann Collision Operator in Basis determined by an Anisotropic Maxwellian Weight Function including Drift", Aust. J. Phys. 33, pp. 449-68, 1980.
- [7] 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.
- [8] 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.
- [9] 송병두, 하성철, 전병훈, "다항근사 볼츠만 방정식의 타당성 검토를 위한 가스의 전자수송계수 비교", 한국전기전자재료학회, 춘계학술대회 논문집, pp. 69-72, 2003.