

볼츠만방정식의 2항근사풀이에 기초한 Ar방전 플라즈마의 전자에너지분포함수결정

김문옥, 손영석

방전플라즈마에서 전자에너지분포함수(EEDF)에 대한 연구는 주로 탐침과 분광학적방법을 비롯한 실험적방법[1]에 의하여 광범히 진행되어왔으며 여러 방전조건에서 볼츠만방정식풀이에 의한 분포함수연구[2, 4, 5]들이 많이 진행되었다.

이 논문에서는 볼츠만방정식의 2항근사풀이를 리용하여 전자에너지분포함수를 결정하기 위한 방법을 고찰하였으며 Ar방전플라즈마에서 분포함수를 결정하고 그에 미치는 여러 인자들의 영향을 평가하였다.

1. 2항근사에 의한 볼츠만방정식의 풀이

플라즈마에서 전자에너지분포함수는 볼츠만방정식으로부터 구할수 있다.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \text{grad} f - \frac{e}{m} (\mathbf{E} \cdot \text{grad}_v f) = \left(\frac{df}{dt} \right)_c \quad (1)$$

전자에너지분포함수가 전공간에서 균일하다고 하면 $\text{grad}_v f$ 는 무시할수 있으며 방정식을 구면자리표계에서 다음과 같이 표시할수 있다.

$$\frac{\partial f}{\partial t} - \frac{eE}{m} \left[\cos \theta \frac{\partial f}{\partial v} + \frac{\sin^2 \theta}{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial (\cos \theta)} \right] = \left(\frac{df}{dt} \right)_c \quad (2)$$

여기서 전기마당의 세기벡터 \mathbf{E} 를 대칭축으로 정의하여 분포함수가 각 φ 와 독립이라는 사실을 고려하였다.(그림 1)

기체가 약하게 이온화되어있다고 가정하고 전자와 중성립자들의 충돌만을 고려하면 볼츠만방정식을 선형화하여 그 풀이를 쉽게 구할수 있다.

이제 모든 충돌을 텀성충돌과 비텀성충돌로 가르면 충돌항은

$$\left(\frac{df}{dt} \right)_c = \left(\frac{df}{dt} \right)_{\text{텀}} + \left(\frac{df}{dt} \right)_{\text{비}} = I(f) + Q(f) \quad (3)$$

로 쓸수 있다. 운동방정식은 각 θ 에 대한 미적분을 포함하고있으므로 수학적으로 고찰하기 힘들다. 분포함수가 속도방향 즉 θ 에 관계되게 하는 인자는 바로 전기마당이다.

전기마당세기가 적당한 크기라고 가정하면 그에 의한 비등방성은 작으므로 근사적으로 분포함수의 기본대칭부분을 고려하여 고찰할수 있다.

각에 대한 상관함수인 $f(t, v, \theta)$ 에 대한 정확한 고찰을 하자면 분포함수를 기본대칭부분으로부터 벗어난 비대칭부분을 포함하는 합렬로 전개하여야 한다. 각에 대한 의존성을 만족시키는 그러한 함수계는 르장드르다항식이므로 위의 가정밑에서 전개식은 첫 두번째 항까지로 제한할수 있다.

$$f(t, v, \theta) = f_0(t, v) + f_1(t, v) \cos \theta \quad (4)$$

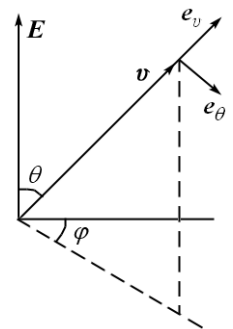


그림 1. 구면자리표계에서 속도벡터

여기서 첫 항은 대칭부분으로서 전자에너지분포함수를 결정하며 비대칭부분인 $f_1 \cos \theta$ 는 전류를 결정한다.

$$f(\varepsilon)d\varepsilon = \varphi(v)dv = v^2 dv \int f(v)d\Omega = 4\pi v^2 f_0(v)dv \quad (5)$$

$$j_t = -e \iint v(\cos^2 \theta) f_1 2\pi v^2 dv \sin \theta d\theta = -\frac{4\pi}{3} e \int v^3 f_1 dv \quad (6)$$

분포함수의 비등방성이 충분히 작을 때 즉 전기마당세기가 그리 크지 않을 때에만 식 (4)에 의한 근사를 리용할수 있다. 여기서 전기마당세기가 그리 크지 않은 경우는 $f_1 \ll f_0$ 이 성립할 때이다. 함수 f_0 과 f_1 을 유도하는 가장 간단한 방법은 르장드르다항식을 리용하는것이다.

방정식 (2)에 르장드르다항식을 곱하고 다항식의 성질을 리용하여 각에 관하여 적분하면 결과적으로 다음식을 얻는다.

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_0}{\partial t} - \frac{eE}{m} \left(\frac{1}{3} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial v} + \frac{2}{3} \cdot \frac{f_1}{v} \right) &= Q(f_0) \\ \frac{\partial f_0}{\partial t} &= \frac{eE}{m} \cdot \frac{1}{3v^2} \cdot \frac{\partial(v^2 f_1)}{\partial v} + Q(f_0) \end{aligned} \quad (7)$$

다음으로 식 (2)에 $P_1 = \cos \theta$ 를 곱하고 적분한다.

유효충돌주파수 $\nu_m = \nu_c(1 - \overline{\cos \theta})$ 를 도입하여 적분을 계산하면 다음식을 쓸수 있다.

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \nu_m f_1 = \frac{eE}{m} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial v} \quad (8)$$

방정식 (7)과 (8)의 정확한 풀이를 구하는것은 명백히 불가능하므로 전기마당이 조화함수 즉 $E = E_0 \sin \omega t$ 로 표시된다고 할 때 분포함수의 대칭부분에 대한 보정항 f_1 이 주기적으로 방향이 변하는 마당에 의해 생긴다고 가정하면 보정항은 전기마당과 같은 주파수로 진동한다.

기본대칭부분함수 f_0 의 시간의존성을 고려하여 방정식 (8)로부터 보정항 f_1 을 기본함수 f_0 으로 표시하면 다음과 같다.

$$f_1 = -\frac{eE_0}{m(\omega^2 + \nu_m^2)} \left\langle \frac{\partial f_0}{\partial v} \right\rangle (\omega \cos \omega t - \nu_m \sin \omega t) \quad (9)$$

식 (7)에 식 (9)를 대입하면 분포함수의 대칭부분에 대한 방정식을 얻을수 있다.

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} = \frac{1}{v^2} \cdot \frac{\partial}{\partial v} \left[\frac{e^2 E^2}{3m^2} \left(\frac{\nu_m(v)v^2}{\omega^2 + \nu_m^2} \right) \frac{\partial f_0}{\partial v} \right] + Q(f_0) \quad (10)$$

직류마당인 경우 식 (9)의 $\omega \rightarrow 0$ 일 때의 극한을 취하여 식 (7)에 대입하면 $\omega = 0$ 일 때의 식 (10)이 얻어진다. 이때 전기마당세기는 E 가 아니라 $\omega \rightarrow 0$ 일 때의 상수로 교체하여야 한다.

식 (10)을 독립변수 $\varepsilon = mv^2/2$, $d\varepsilon = mv dv$ 에 대한 방정식으로 다시 쓰고 $f_0(t, v)$ 를 에너지분포함수 $f_0(t, \varepsilon)$ 으로 교체하면 전자에너지분포함수에 대한 방정식을 얻을수 있다.

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial J}{\partial \varepsilon} + Q, \quad J = -D \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} + fU \quad (11)$$

$$D = A\varepsilon, U = A/2, A = \frac{2e^2 E^2}{3m} \cdot \frac{v_m}{\omega^2 + v_m^2} = \frac{e^2 E_0^2}{3m} \cdot \frac{v_m}{\omega^2 + v_m^2}$$

식 (11)은 텅자의 1차원확산방정식과 매우 유사하다. 즉 ε 은 자리표, f 는 텅자의 밀도, J 는 텅자흐름, Q 는 원천량, D 는 자리표 즉 여기서는 ε 에 관계되는 확산계수로, U 는 운동학적흐름 실례로 매질의 흐름에 의해 발생할수 있는 표류운동의 속도로 볼수 있다.

정상상태 즉 시간에 따라 분포함수가 변하지 않는다고 하면 식 (11)은 다음과 같다.

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(Uf - D \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) = Q \quad (12)$$

2. Ar방전플라즈마에서 전자에너기분포함수의 결정

방정식 (12)를 풀자면 플라즈마에서 일어나는 충돌들과 매 충돌의 충돌자름면적들이 주어지고 경계조건이 설정되어야 한다.

Ar방전플라즈마에서 다음과 같은 과정

$e + Ar \rightarrow e + Ar$, $e + Ar \rightarrow e + Ar_s$, $e + Ar_s \rightarrow e + Ar$, $e + Ar \rightarrow 2e + Ar^+$, $e + Ar_s \rightarrow 2e + Ar^+$ 등이 일어나는것으로 고찰하였다. 이 과정들의 충돌자름면적은 선행연구자료들을 리용하고 경계조건은 $\partial f / \partial \varepsilon = 0$ ($\varepsilon = 0$), $f = 0$ ($\varepsilon \rightarrow \infty$)으로 주었다.

플라즈마에서 에너기가 0보다 작은 전자는 없으므로 경계 1 즉 $\varepsilon = 0$ 에서 링에너기흐름조건을 설정하였으며 무한히 큰 에너지를 가지는 전자는 없으므로 경계 2 즉 $\varepsilon = 100\text{eV}$ 에서 링확률조건을 주었다.

COMSOL5.2프로그램의 플라즈마모듈을 리용하여 기체온도가 300K, 전자밀도가 10^{18}m^{-3} , 이온화도가 10^{-6} , 전자의 평균에너기가 4eV인 1차원직류플라즈마모형을 세우고 전자에너기분포함수에 대한 방정식을 유한요소법으로 풀기 위한 계산알고리즘에 따라 분포함수를 계산하고 여러가지 인자들의 영향을 고찰하였다.

먼저 환산전기마당세기 $E/n = 10$, 20Td($1\text{Td} = 10^{-17}\text{V} \cdot \text{cm}^2$)인 경우 이온화도에 따르는 전자에너기분포함수를 계산하였다.(그림 2, 3)

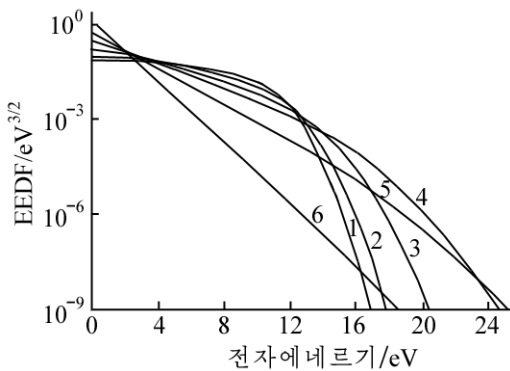


그림 2. $E/n=10\text{Td}$ 인 경우 이온화도에 따르는 전자에너기분포함수의 변화
1-6은 이온화도가 각각 10^{-6} , 10^{-5} , 10^{-4} , 10^{-3} , $5 \cdot 10^{-3}$, 10^{-2} 인 경우

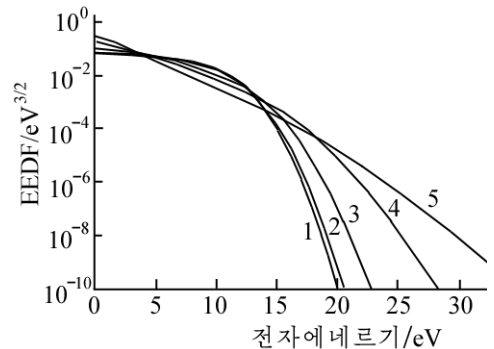


그림 3. $E/n=20\text{Td}$ 인 경우 이온화도에 따르는 전자에너기분포함수의 변화
1-5는 이온화도가 각각 10^{-6} , 10^{-5} , 10^{-4} , 10^{-3} , 10^{-2} 인 경우

이온화도가 증가할수록 전자에너지분포함수가 막스웰분포함수로 다가가는 경향성을 가지는것은 다음과 같이 설명할수 있다.

방전플라즈마에서 이온화도가 증가할수록 즉 전자밀도가 증가할수록 전자들사이의 충돌과정이 보다 활발하게 진행되면서 전자들사이의 평형이 더 빨리 이루어지며 결국 전자들의 분포함수가 막스웰분포함수로 다가간다. 전기마당세기가 증가할수록 전자들이 전기마당으로부터 얻는 에너지가 증가하며 결국 전자들의 에너지가 커진다. 이로부터 전기마당이 증가할 때 전자에너지분포함수에서 빠른 전자들이 차지하는 몫이 더 커진다.

그림 2와 3에서 같은 이온화도의 곡선들을 대비해보면 이러한 경향성이 뚜렷이 나타난다는것을 알수 있다.

다음으로 려기원자비률($N_{\text{리}}/N$)에 따르는 전자에너지분포함수의 변화를 고찰하였다.(그림 4, 5)

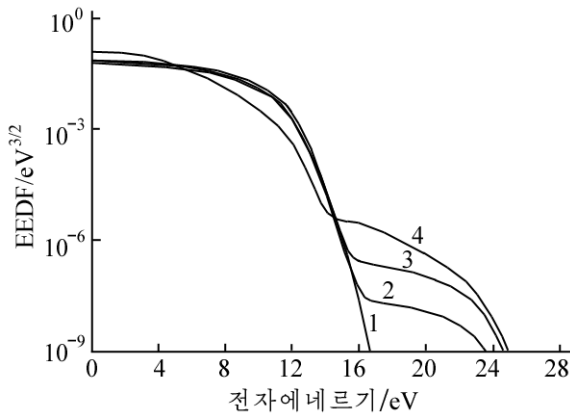


그림 4. $E/n=10\text{Td}$ 인 경우 려기원자비률에 따르는 전자에너지분포함수의 변화
1-4는 려기원자비률이 각각
0, 10^{-5} , 10^{-4} , 10^{-3} 인 경우

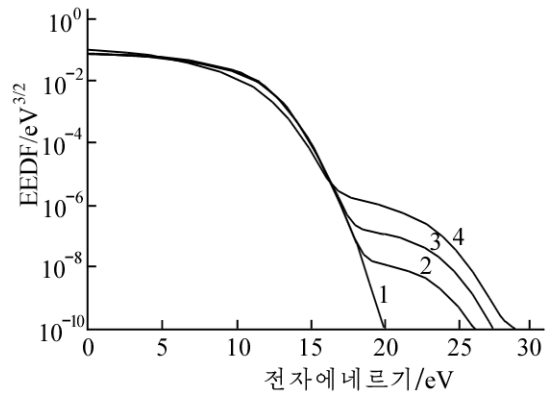


그림 5. $E/n=20\text{Td}$ 인 경우 려기원자비률에 따르는 전자에너지분포함수의 변화
1-4는 려기원자비률이 각각
0, 10^{-5} , 10^{-4} , 10^{-3} 인 경우

그림 4에서 곡선 1은 려기원자들이 없는 경우이다. 그림 4에서 알수 있는것처럼 전자에너지분포함수는 려기에너지근방(약 11eV)에서 뚜렷한 변화를 보여준다. 이것은 려기억에너지근방에서 전자에너지분포함수가 이지러진다는 선행연구결과[3]와 잘 일치한다.

려기원자비률이 클수록 분포함수에서 보다 높은 에너지를 가지는 빠른 전자들의 몫이 증가하며 전기마당세기가 커질 때 빠른 전자들의 에너지대역은 더 커진다. 그림 5로부터 려기원자비률에 따라 빠른 전자들이 분포되는 에너지대역은 전기마당세기가 커질수록 더 좁아진다는것을 알수 있다.

맺 는 말

르장드르다항식을 리용하여 전자에너지분포함수를 2항근사시켜 볼츠만방정식으로 부터 분포함수를 계산하기 위한 계산알고리즘을 작성하였다.

Ar방전플라즈마에서 전자에너지분포함수를 계산하고 이온화도와 려기원자비률이 분포함수에 미치는 영향을 평가하였다.

참 고 문 헌

- [1] 김일성 종합대학학보(자연과학), 55, 11, 23, 주체98(2009).
- [2] 김일성 종합대학학보(자연과학), 48, 12, 41, 주체91(2002).
- [3] B. M. Smirnov; Theory of Gas Discharge Plasma, Springer, 113~141, 278~284, 2015.
- [4] J. S. Kim et al.; IEEE Transactions on Plasma Science, 42, 12, 3819, 2014.
- [5] G. J. M. Hagelaar et al.; Plasma Sources Science and Technology, 14, 722, 2005.

주체110(2021)년 3월 5일 원고접수

Determination of the Electron Energy Distribution Function Using the Two-Term Approximation of the Boltzmann Equation

Kim Mun Ok, Son Yong Sok

In this paper, we considered a method to determine the electron energy distribution function using the two-term approximation of the Boltzmann equation and evaluated the influence of ionization rate and excited atom ratio on the distribution function in Ar discharge plasma. The calculation was performed by COMSOL5.2 and the results were analyzed.

Keywords: electron energy distribution function(EEDF), two-term approximation, Boltzmann equation