

류체모형에 의한 용량결합아르곤미광방전플라즈마 특성량들의 1차원모의

윤정학, 강춘일, 김문옥

고주파방전플라즈마는 핵융합실험장치들에서 플라즈마가열, 나노재료의 개발과 인조금강석합성을 비롯하여 핵융합기술과 나노공학, 결면처리 및 재료합성기술 등 첨단기술분야들에서 널리 쓰이고있다.[1] 특히 아르곤미광방전플라즈마는 기체방전플라즈마에 대한 이론적연구에서 가장 기초적이며 핵심적인 자리를 차지한다.[3, 4]

우리는 용량결합아르곤미광방전플라즈마에서 류체모형에 의한 플라즈마특성량들의 1차원모의계산을 진행하였다.

1. 계산모형과 기본방정식

용량결합아르곤고주파미광방전모형은 그림 1과 같다.[2]

평행으로 놓인 2개의 극판사이에 일정한 전압을 걸어주면 기체방전에 의하여 플라즈마가 발생하는데 전극의 크기가 전극사이의 거리에 비하여 대단히 크면 1차원으로 모형화할수 있다.

극판사이간격이 $d = 2.54\text{cm}$ 인 방전관의 전극에 13.56MHz 인 고주파전압이 걸릴 때 미광방전플라즈마 모형에 대한 가정은 다음과 같다.

방전은 2개의 큰 평행평판전도성전극사이에서 일어난다고 가정한다. 립자흐름은 확산과 표류에 의하여 진행되며 대류기체흐름의 영향을 무시한다. 전자에네르기분포함수는 막스웰분포를 따른다고 보고 에네르기 방정식을 풀어서 전자의 온도를 구한다.

립자의 확산계수와 이동도는 기체수밀도가 주어진 경우에 상수로 된다. 자기마당의 영향은 고려하지 않으며 분자이온 Ar_2^+ 과 음이온들은 무시한다. 분자이온이 총이온밀도의 2% 밖에 되지 않고 전자와 재결합되어 중성원자로 되기때문에 $1\text{Torr}(133.3\text{Pa})$ 이하의 기체압력에서는 무시할수 있다. 그러나 준안정원자들은 방전과정에 무시할수 없는 영향을 주기때문에 계산정확성을 높이기 위해서는 반드시 고려해야 한다.[4]

우의 가정으로부터 아르곤미광방전플라즈마에서 다음과 같은 전자, 양이온, 준안정원자들의 충돌과정들을 고려할수 있다.

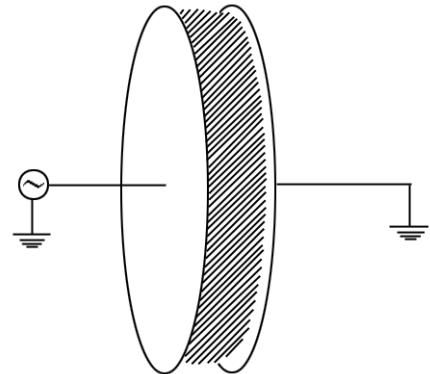
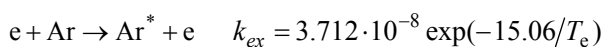
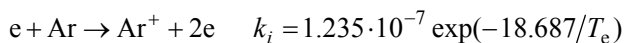
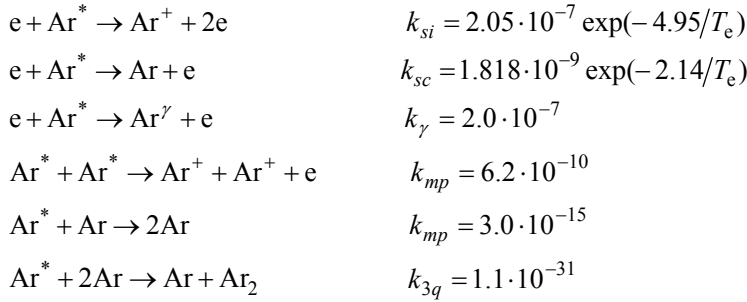


그림 1. 용량결합아르곤고주파
미광방전모형



여기서 k 는 반응결수, T_e 는 전자의 온도이다. 반응결수 k 의 단위는 cm^3/s 이며 k_{3q} 의 경우에 cm^6/s 이다.

우의 충돌과정들을 고려하여 전자와 양이온, 준안정원자에 대한 연속방정식(립자수밀도방정식)은 다음과 같이 쓸수 있다.

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_i = k_i n_n n_e + k_{si} n_m n_e + k_{mp} n_m^2 \quad (1)$$

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_e = k_i n_n n_e + k_{si} n_m n_e + k_{mp} n_m^2 \quad (2)$$

$$\frac{\partial n_m}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_m = k_{ex} n_n n_e - k_{si} n_m n_e - k_{sc} n_m n_e - k_r n_m n_e - 2k_{mp} n_m^2 - k_{2q} n_n n_m + k_{3q} n_n^2 n_m \quad (3)$$

립자흐름은 전기마당의 영향에 의한 표류와 밀도구배에 의한 확산에 의하여 주어진다. 준안정원자의 경우 표류항을 무시하면 3개의 립자종들의 립자흐름밀도는 다음과 같다.

$$\mathbf{J}_i = -D_i \nabla n_i + \mu_i n_i \mathbf{E} \quad (4)$$

$$\mathbf{J}_e = -D_e \nabla n_e - \mu_e n_e \mathbf{E} \quad (5)$$

$$\mathbf{J}_m = -D_m \nabla n_m \quad (6)$$

전자의 에네르기평형방정식은 다음과 같이 주어진다.

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2} n_e k T_e \right) + \nabla \cdot \mathbf{q}_e + e \mathbf{J}_e \cdot \mathbf{E} + H_i k_i n_n n_e + H_{ex} k_{ex} n_n n_e + H_{si} k_{si} n_m n_e + H_{sc} k_{sc} n_m n_e = 0 \quad (7)$$

여기서 \mathbf{q}_e 는 전자에네르기의 총흐름으로서

$$\mathbf{q}_e = -K_e \nabla T_e + \frac{5}{2} k T_e \mathbf{J}_e \quad (8)$$

이며 K_e 는 전자의 열전도결수로서 다음과 같이 주어진다.

$$K_e = \frac{3}{2} k D_e n_e \quad (9)$$

전기마당세기와 전위는 뽁쑹방정식

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{e}{\epsilon_0} (n_i - n_e) \quad (10)$$

$$\mathbf{E} = -\nabla V \quad (11)$$

로부터 계산할수 있다.

우의 방정식들에서 n_j , \mathbf{J}_j , D_j , μ_j ($j=e, +, *$)는 각각 립자밀도, 립자흐름, 확산결수, 이동도를 표시하며 첨수 $e, +, *$ 은 각각 전자, 양이온, 준안정원자를 나타낸다. 그리고 탄성 충돌에 의한 에네르기손실은 무시된다.

경계조건은 다음과 같다.

$$\mathbf{J}_i = \mu_i n_i \mathbf{E}, \mathbf{J}_e = -k_s n_e - \gamma \mathbf{J}_i, n_m = 0, T_e = T_{eb}, V = V_A \sin(2\pi ft) \quad (x=0) \quad (12)$$

$$\mathbf{J}_i = \mu_i n_i \mathbf{E}, \mathbf{J}_e = k_s n_e - \gamma \mathbf{J}_i, n_m = 0, T_e = T_{eb}, V = 0 \quad (x=d) \quad (13)$$

여기서 T_e 는 벽근방에서의 전자온도, V_A 는 고주파전압의 진폭이다.

초기조건은 다음과 같다.

$$n_i = n_e = n_m = n_\varepsilon \left[\varepsilon + 16 \left(1 - \frac{x}{d} \right)^2 \left(\frac{x}{d} \right)^2 \right], T_e = T_{ei} = 0.5 \text{eV}, V = 0 \quad (14)$$

여기서 $n_\varepsilon = 10^9 \text{cm}^{-3}$, $\varepsilon = 0.01$ 이다.

모의계산에서 리용된 아르곤미광방전플라즈마의 파라미터들은 선행연구[2]의 결과를 리용하였다.

2. 플라즈마특성량들에 대한 1차원모의계산

용량결합미광방전과정에서 전극의 크기가 극판사이간격에 비하여 큰 경우에는 1차원으로 모형화하여 계산할수 있다. 이때 런립미분방정식들은 다음과 같은 형태로 표시된다.

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} - \mu_e \frac{\partial}{\partial t} (E \cdot n_e) = D_e \frac{\partial^2 n_e}{\partial x^2} + S \quad (15)$$

$$\frac{\partial n_m}{\partial t} = D_m \frac{\partial^2 n_m}{\partial x^2} + S_m \quad (16)$$

$$\frac{\partial p_e}{\partial t} - \frac{5}{3} \mu_e \frac{\partial}{\partial x} (E \cdot p_e) = \frac{5}{3} D_e \frac{\partial^2 p_e}{\partial x^2} - \frac{2}{3} D_e \frac{\partial}{\partial x} \left(n_e \frac{\partial T_e}{\partial x} \right) + \frac{2}{3k} (P_c - P_l) \quad (17)$$

$$-\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = \frac{e}{\varepsilon_0} (n_i - n_e) \quad (18)$$

$$E = -\frac{\partial V}{\partial x} \quad (19)$$

여기서

$$S = k_i n_n n_e + k_{si} n_m n_e + k_{mp} n_m^2,$$

$$S_m = k_{ex} n_n n_e - k_{si} n_m n_e - k_{sc} n_m n_e - k_r n_m n_e - 2k_{mp} n_m^2 - k_{2q} n_n n_m - k_{3q} n_n^2 n_m,$$

$$P_c = e D_e E \frac{\partial n_e}{\partial x} + e \mu_e n_e E^2,$$

$$P_l = H_i k_i n_n n_e + H_{ex} k_{ex} n_n n_e + H_{si} k_{si} n_m n_e + H_{sc} k_{sc} n_m n_e,$$

$$p_e = n_e T_e$$

이다. 이 런립미분방정식계의 풀이에 계차법을 리용하였다.

일반적으로 류체모형에 의하여 플라즈마모의를 진행하는 방법에는 계차법과 유한요소법이 있다.

유한요소법을 리용하여 플라즈마를 모의하는 모의계산체계인 COMSOL 5.2를 리용하여 같은 조건에서 모의하였을 때 그 계산결과는 선행연구[3, 4]의 결과와 차이난다.

무분화결수를 $n_0 = 10^{10} \text{cm}^{-3}$, $T_{e0} = 1 \text{eV}$, $V_0 = 100 \text{V}$ 로 설정하였으며 극판사이의 거리

를 1 000등분하고 시간걸음은 고주파임펄스주기를 10 000등분하여 3 000주기동안 계산하였다. 한주기의 계산이 끝날 때마다 수렴성을 판정하여 모든 물리적량들이 일정한 값으로 수렴하는가를 평가하였다.

모의계산을 진행하는데서 세줄대각선행렬로 표시되는 런립방정식풀이와 오차평가를 모듈화하여 계산속도를 빠르게 하였으며 플라스마특성량변수들을 시간적으로 $t-1$ 시각과 t 시각 2개의 값들만을 취함으로써 변수들에 대한 기억용량을 줄이고 속도도 빠르게 하였다.

계산프로그램의 정확성을 검증하기 위하여 계산결과를 선행연구[3, 4]의 결과, 같은 조건의 아르곤고주파미광방전플라스마에서 유한요소법을 리용한 COMSOL 5.2에 의하여 계산된 결과와 비교하였다.

전자밀도, 양이온밀도, 준안정원자밀도, 전자온도에 대한 계산결과는 그림 2-5와 같다.

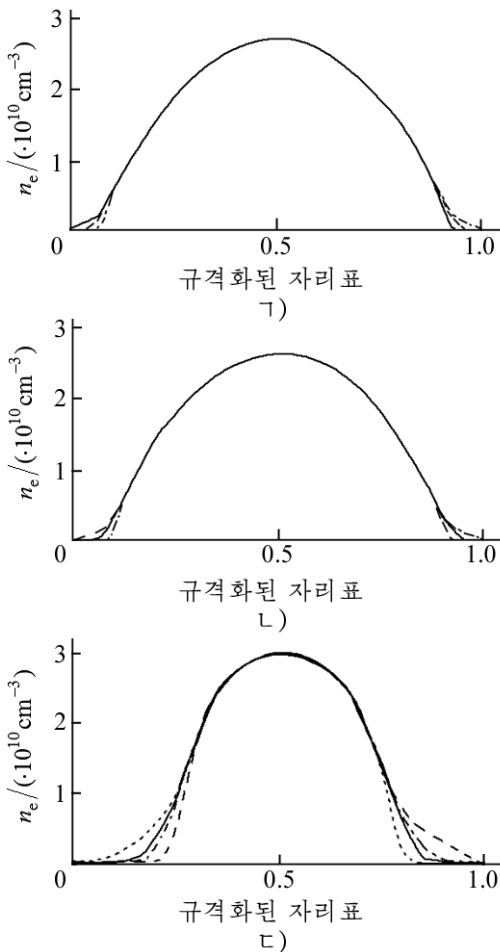


그림 2. 전자밀도계산결과

ㄱ) 계산값, ㄴ) 선행연구값[3], ㄷ) COMSOL 5.2

실선 - $T=0$, 절선 - $T=0.25$,

반점선 - $T=0.50$, 점선 - $T=0.75$

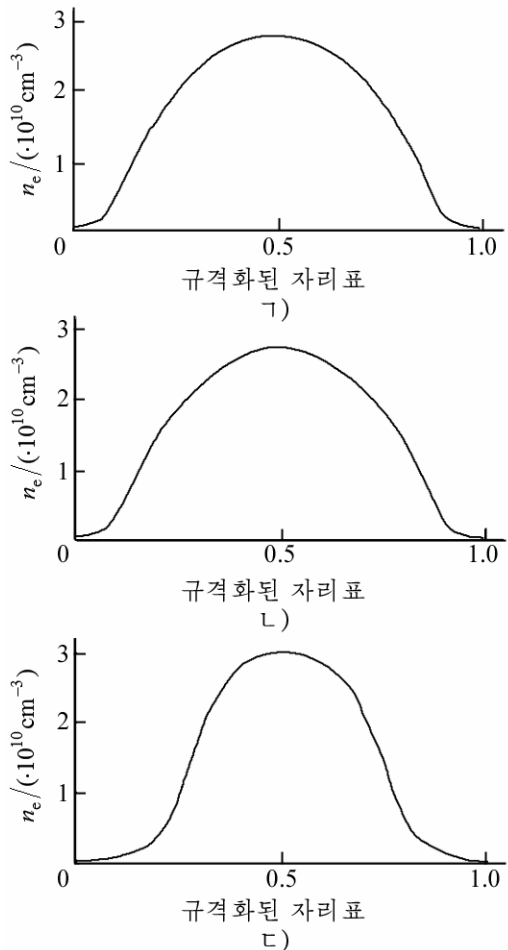


그림 3. 양이온밀도계산결과

ㄱ) 계산값, ㄴ) 선행연구값[3], ㄷ) COMSOL 5.2

마지막 계산주기의 4개 전압위상에 대한 결과는 그림 2와 같다. 그림에서 $T=0$ 은 고주파전극에 전압이 걸리지 않은 경우, $T=0.25$ 는 최대의 전압이 걸린 경우를 의미한다. 위

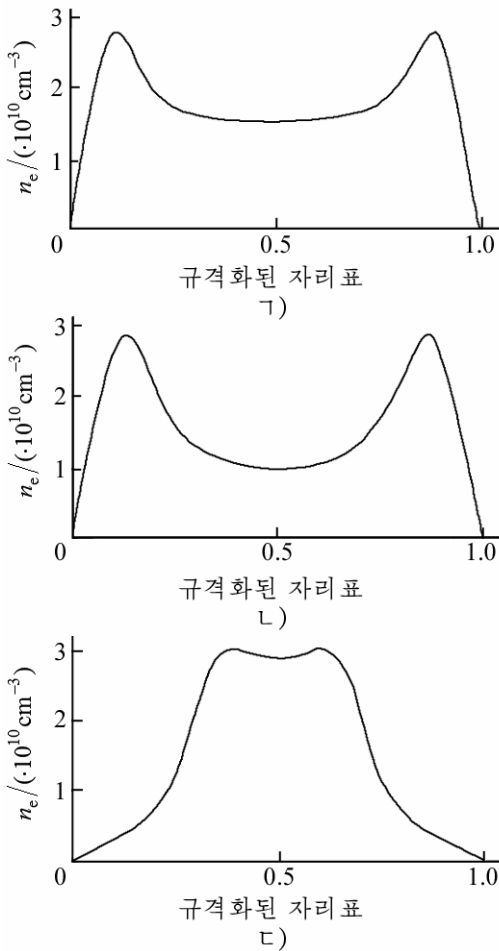


그림 4. 준안정원자밀도계산결과

ㄱ) 계산값, ㄴ) 선행연구값[3], ㄷ) COMSOL 5.2

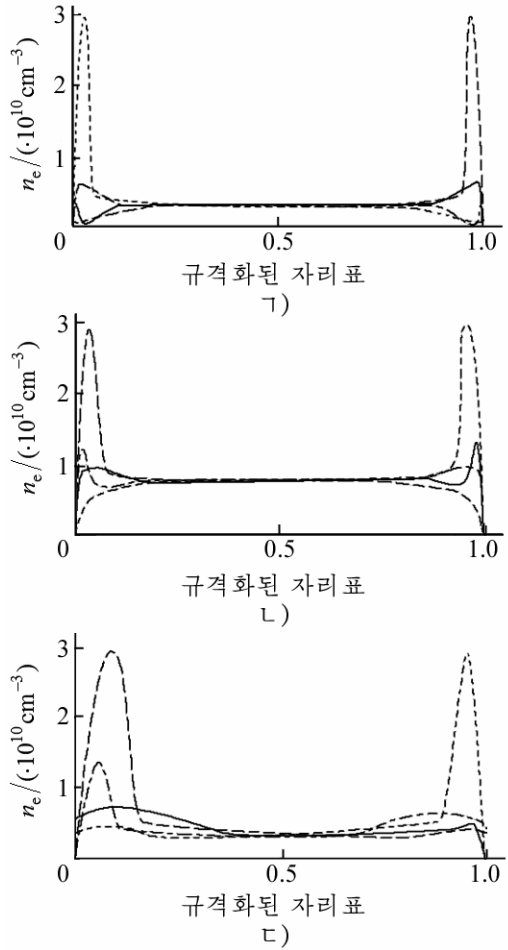


그림 5. 전자온도계산결과

ㄱ) 계산값, ㄴ) 선행연구값[3], ㄷ) COMSOL 5.2

 실선 - $T=0$, 점선 - $T=0.25$,
 반점선 - $T=0.50$, 점선 - $T=0.75$

치는 극판사이거리를 1로 규격화하여 표시하였다.

그림 2에서 전자밀도분포는 극판의 중심부분에서 변화가 없고 양쪽 극판가까이에서 위상에 따라 변한다. 그림 3에서 양이온밀도분포는 위상에 따라 거의 변화가 없는데 이것은 양이온들이 전자에 비하여 매우 무거우므로 고주파전기마당에서는 밀도변화가 잘 나타나지 않는 것과 관련된다. 그림 4에서 준안정원자밀도분포도 양이온밀도분포와 마찬가지로 위상에 따라 변하지 않고 양쪽극판근방에서 봉우리를 이루며 그림 5에서 전자온도는 극판가까이에서 위상에 따라 급격히 변하나 중심부분에서는 변화가 거의 없다. 그러나 유한요소법을 리용한 COMSOL 5.2에 의한 계산결과에서는 곡선의 오목부분이 선행연구의 결과처럼 명확하게 나타나지 않는다. 이것은 계차법을 리용한 계산프로그램이 유한요소법을 리용한 COMSOL 5.2보다 우월하다는 것을 보여준다.

그림들에서 보는바와 같이 계산결과는 선행연구[3, 4]의 결과와 비교적 잘 일치한다.

맺 는 말

용량결합고주파미광방전플라즈마에서 전자, 양이온, 준안정 원자들의 8가지 기본호상작용들을 고려한 류체모형에 의하여 특성량들을 평가하였다.

13.56MHz고주파전기마당이 걸린 평행평판형아르곤미광방전플라즈마에서 특성량들에 대한 1차원모의계산을 진행하고 선행연구결과와 비교하여 정확성을 검증하였다.

참 고 문 헌

- [1] A. Bogaerts et al.; Spectrochimica Acta, B 57, 609, 2002.
- [2] D. P. Lymberopoulos and D. J. Economou; Journal of Applied Physics, 73, 3668, 1993.
- [3] Yu Qian et al.; Chin. Phys. Lett., 25, 7, 2569, 2008.
- [4] Yu-Ru Zhang et al.; Physics of Plasmas, 17, 033507, 2010.

주체106(2017)년 9월 5일 원고접수

One-Dimensional Simulation of Capacitively Coupled Argon Glow Discharge Plasma Characteristics by Fluid Model

Yun Jong Hak, Kang Chun Il and Kim Mun Ok

We suggested a method to simulate the characteristics of the capacitively coupled Argon glow discharge plasma in 13.56MHz-high frequency electric field by fluid model and FEM(finite difference method). This method was applied to determining the distributions of densities of electron, positive ion and metastable atom, temperature of electron and voltage between plates.

Key words: fluid model, glow discharge, finite difference method