



저작자표시-비영리-변경금지 2.0 대한민국

이용자는 아래의 조건을 따르는 경우에 한하여 자유롭게

- 이 저작물을 복제, 배포, 전송, 전시, 공연 및 방송할 수 있습니다.

다음과 같은 조건을 따라야 합니다:



저작자표시. 귀하는 원저작자를 표시하여야 합니다.



비영리. 귀하는 이 저작물을 영리 목적으로 이용할 수 없습니다.



변경금지. 귀하는 이 저작물을 개작, 변형 또는 가공할 수 없습니다.

- 귀하는, 이 저작물의 재이용이나 배포의 경우, 이 저작물에 적용된 이용허락조건을 명확하게 나타내어야 합니다.
- 저작권자로부터 별도의 허가를 받으면 이러한 조건들은 적용되지 않습니다.

저작권법에 따른 이용자의 권리는 위의 내용에 의하여 영향을 받지 않습니다.

이것은 [이용허락규약\(Legal Code\)](#)을 이해하기 쉽게 요약한 것입니다.

[Disclaimer](#)

공학박사학위논문

열증착 공정에서 노즐 형상에 따른 방사특성 모델

Angular Distribution of Molecular flow from
Nozzles in Thermal Evaporation Process

2016 년 8 월

서울대학교 대학원

기계항공공학부

이 명 선

국문 초록

열증착 공정에서 노즐 형상에 따른 방사특성 모델

반도체, OLED 제조과정에서 주로 사용되는 열증착(Thermal Evaporation) 방식의 소스는 특정한 용기에 들어 있는 물질을 가열하여 기화 혹은 승화시켜 원통형 노즐을 통해 기관에 분사 시킨다. 이때 노즐을 통해서 방출되는 분자의 방사특성(Angular Distribution)에 따라 기관에 증착되는 물질의 두께가 달라진다.

누센(Knudsen)의 코사인 법칙(Cosine Law)에 따르면 얇은 오리피스 형태의 노즐에서 방출되는 분자는 코사인 함수의 형태($\cos\theta$)를 보이고, 길이를 갖는 원통형 노즐에서 방출되는 분자는 코사인 지수함수의 형태($\cos^n\theta$)와 유사하다는 것이 알려져있다.

하지만 실제 노즐에서 방출되는 분자의 방사 특성은 코사인 지수함수의 형태와 정확하게 일치하지 않는다. 이와 관련하여 노즐의 방사 특성을 정확하게 나타내기 위한 방법들이 많이 연구되었다. 대표적으로 방법으로 수치적분법을 이용하여 노즐에 입사되는 분자의 분포와 노즐의 벽면에서 반사되는 분자의 분포 전체를 적분하는 방법이 있다. 또 다른 방법으로는 몬테카를로 방법을 통해 노즐 출구에서 방출되는 분자의 형태를 시뮬레이션하는 방법이 있다. 이러한 기존 방법들은 노즐의 방사특성을 정확하게 모델링하고 있지만, 해석적 해의 형태로 나타낼 수 없기 때문에 노즐의 형상이 변하면 매번 동일한 계산 과정을 필요로 한다.

본 연구에서는 일반적으로 많이 사용되는 노즐의 형태인 원통형 노즐과 원뿔형 노즐에서 특정한 근사화를 통해 노즐의 방사특성을

정확하게 모델링하는 해석적 해(analytical solution)를 구하고 구해진 모델의 방사특성을 실제 증착 실험과 몬테카를로 시뮬레이션 방법의 방사특성 결과와 비교 검증 하였다.

.....

주요어 : 열증착, 노즐, 방사특성, 분자 유동, 몬테카를로 시뮬레이션,
원통형 노즐, 원뿔형 노즐

학번: 2005-23448

목차

국문 초록.....	i
목차.....	iii
그림 목차.....	vii
표 목차.....	xi
제1장. 서론.....	1
1.1 연구 배경.....	1
1.2 연구 방향.....	3
1.3 연구 내용.....	5
제2장. 배경이론.....	7
2.1 노즐의 방사특성.....	7
2.2 노즐의 방사특성에 따른 증착 프로파일 계산.....	9
2.3 수치적분법.....	11
2.3.1 수치적분법의 계산 방법.....	11
2.3.2 노즐의 벽면에 충돌하지 않고 통과하는 분자.....	13
2.3.3 노즐의 벽면에 충돌한 후 출구로 방출되는 분자.....	16
2.4 몬테카를로 시뮬레이션.....	19
2.4.1 몬테카를로 시뮬레이션 방법.....	19
2.4.2 몬테카를로 시뮬레이션을 통한 노즐의 방사특성 계산...20	
2.4.3 몬테카를로 시뮬레이션 결과.....	21
제3장. 원통형 노즐의 방사특성.....	24
3.1 원통형 노즐의 방사특성 계산.....	24
3.1.1 방사특성 계산을 위한 근사화.....	24
3.1.2 원통형 노즐의 방사특성 계산 방법.....	27

3.1.3	노즐 벽면에 충돌 후 노즐 출구로 방출되는 분자, $\tan \phi > 2r/l$	29
3.1.4	노즐 벽면에 충돌 후 노즐 출구로 방출되는 분자, $\tan \phi < 2r/l$	37
3.1.5	노즐 입구에서 노즐 출구로 방출되는 분자, $\tan \phi < 2r/l$	40
3.1.6	원통형 노즐의 방사특성.....	42
3.2	원통형 노즐의 방사특성 결과.....	44
3.3	몬테카를로 시뮬레이션 결과.....	46
3.3.1	몬테카를로 시뮬레이션.....	46
3.3.2	원통형 노즐($r=1, l=2$)의 방사특성.....	52
3.3.3	원통형 노즐($r=1, l=3$)의 방사특성.....	57
3.3.4	원통형 노즐($r=1, l=4$)의 방사특성.....	60
3.3.5	원통형 노즐($r=1, l=6$)의 방사특성.....	64
제4장	원뿔형 노즐의 방사특성.....	69
4.1	원뿔형 노즐의 방사특성 계산.....	69
4.1.1	원뿔형 노즐의 방사특성 계산 방법.....	69
4.1.2	노즐 입구 전체에서 노즐 출구로 방출되는 분자, $\tan \phi < (r_o - r_i)/l$	73
4.1.3	노즐 벽면 전체에서 노즐 출구로 방출되는 분자, $\tan \phi < (r_o - r_i)/l$	73
4.1.4	노즐 입구 일부에서 노즐 출구로 방출되는 분자, $(r_o - r_i)/l < \tan \phi < (r_o + r_i)/l$	76
4.1.5	노즐 벽면 일부에서 노즐 출구로 방출되는 분자, $(r_o - r_i)/l < \tan \phi < (r_o + r_i)/l$	79
4.1.6	노즐 벽면 일부에서 노즐 출구로 방출되는 분자, $\tan \phi > (r_o + r_i)/l$	92
4.1.7	원뿔형 노즐의 방사특성.....	96

4.2	원뿔형 노즐의 방사특성 결과.....	99
4.3	몬테카를로 시뮬레이션 결과.....	102
4.3.1	몬테카를로 시뮬레이션.....	102
4.3.2	원통형 노즐($r_i=1, r_o=2, l=6$)의 방사특성.....	105
4.3.3	원통형 노즐($r_i=1, r_o=4, l=6$)의 방사특성.....	109
4.3.4	원통형 노즐($r_i=1, r_o=6, l=6$)의 방사특성.....	113
제5장	실제 노즐의 방사특성.....	117
5.1	정지 성막 실험.....	117
5.1.1	실험 방법.....	117
5.1.2	실험 조건.....	121
5.1.3	실험 결과.....	123
5.2	몬테카를로 시뮬레이션.....	127
5.2.1	시뮬레이션 방법.....	127
5.2.2	노즐의 방사특성을 구하는 방법.....	132
5.2.3	시뮬레이션 결과.....	135
5.3	방사특성 결과 비교.....	142
5.3.1	정지 성막 실험 결과(CASE 1).....	142
5.3.2	정지 성막 실험 결과(CASE 2).....	148
제6장	노즐의 방사특성 함수를 이용한 균일도 최적화.....	153
6.1	소스 기관 거리 및 읍셋 최적화.....	153
6.1.1	물질 소모에 따른 기관 균일도 변화.....	153
6.1.2	소스 기관 거리 및 읍셋 변화에 따른 균일도 변화.....	154
6.1.3	소스 기관 거리 및 읍셋 최적값.....	157
6.2	소스의 형상 최적화.....	158
6.2.1	소스 형상 변화에 따른 기관 균일도 변화.....	158

6.2.2 소스 형상 변화에 따른 균일도 변화.....	159
6.2.3 소스 형상 최적값.....	160
제7장. 결론.....	162
참고문헌.....	164
APPENDIX.....	166
A. 노즐 내부 벽면의 형상에 따른 방사특성 변화.....	167
A.1 시뮬레이션 설계.....	167
A.2 시뮬레이션 결과.....	168
A.3 분석.....	172

그림 목차

그림 1-1. 열증착(Thermal Evaporation) 소스 구조.....	
1	
그림 2-1. 누센(Knudsen)의 코사인 법칙.....	7
그림 2-2. 노즐의 방사특성.....	8
그림 2-3. 노즐에서 방출되는 물질의 경로.....	9
그림 2-4. 노즐에서 방출된 물질이 만드는 면적각.....	10
그림 2-5. 노즐 입구에 입사된 분자가 노즐 출구로 방출되는 경로....	13
그림 2-6. 노즐 벽면에서 반사된 분자가 노즐 출구로 방출되는 경로.....	16
그림 2-7. 몬테카를로 시뮬레이션.....	20
그림 2-8. 노즐 출구로 이동하는 분자의 경로.....	21
그림 2-9. 몬테카를로 시뮬레이션 결과.....	22
그림 3-1. 적분 모델과 몬테카를로 시뮬레이션 근사 함수 비교.....	25
그림 3-2. 노즐 출구에서 방출되는 분자.....	26
그림 3-3. 노즐 입구에서 k 방향으로 방출되는 분자.....	27
그림 3-4. 노즐 벽면에서 k 방향으로 방출되는 분자.....	28
그림 3-5. 노즐 벽면에서 k 방향으로 방출되는 분자들.....	29
그림 3-6 분자를 방출할 수 있는 원호의 경계값.....	32
그림 3-7 원호의 경계값 변화.....	33
그림 3-8 노즐의 방출각(ϕ)에 따른 물질 방출 위치 변화.....	37
그림 3-9 $z=1$ 위치에서 원호의 경계값.....	39
그림 3-10 노즐 입구에서 출구로 방출되는 분자.....	40
그림 3-11 원통형 노즐 형상.....	41
그림 3-12 반지름 $r=1$, 노즐 길이 $l=4$ 인 원통형 노즐.....	42
그림 3-13 노즐($r=1, l=4$)의 방사특성 결과.....	45
그림 3-14 OpenFOAM 기반의 DSMC Solver.....	47
그림 3-15 원통형 노즐($r=1, l=2$).....	52
그림 3-16 원통형 노즐($r=1, l=2$)의 방사특성.....	52
그림 3-17 몬테카를로 시뮬레이션과 해석적 해의 차이값.....	53

그림 3-18 원통형 노즐($r=1, l=2$)의 방사특성.....	54
그림 3-19 원통형 노즐($r=1, l=3$).....	57
그림 3-20 원통형 노즐($r=1, l=3$)의 방사특성.....	57
그림 3-21 원통형 노즐($r=1, l=3$)의 방사특성.....	58
그림 3-22 원통형 노즐($r=1, l=4$).....	61
그림 3-23 원통형 노즐($r=1, l=4$)의 방사특성.....	61
그림 3-24 원통형 노즐($r=1, l=4$)의 방사특성.....	62
그림 3-25 원통형 노즐($r=1, l=6$).....	65
그림 3-26 원통형 노즐($r=1, l=6$)의 방사특성.....	65
그림 4-1 원통형 노즐과 원뿔형 노즐의 임계각.....	69
그림 4-2 원통형 노즐.....	71
그림 4-3 노즐 입구에서 방출되는 분자.....	72
그림 4-4 노즐 벽면에서 방출되는 분자.....	73
그림 4-5 노즐 입구에서 분자 방출 영역.....	76
그림 4-6 노즐 벽면에서 분자 방출 영역.....	79
그림 4-7 노즐 출구에서 z 만큼 떨어진 위치에서 노즐 단면.....	82
그림 4-8 노즐 벽면의 분자 방출 한계 위치 w	92
그림 4-9 원뿔형 노즐의 형상.....	96
그림 4-10, 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=2, l=6$)	99
그림 4-11 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=2, l=6$)의 방사특성 결과.....	100
그림 4-12 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=2, l=6$)	105
그림 4-13 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=2, l=6$)의 방사특성.....	105
그림 4-14 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=2, l=6$)의 방사특성.....	106
그림 4-15 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=4, l=6$)	109
그림 4-16 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=4, l=6$)의 방사특성.....	109
그림 4-17 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=4, l=6$)의 방사특성.....	111
그림 4-18 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=6, l=6$)	113
그림 4-19 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=6, l=6$)의 방사특성.....	113
그림 4-20 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=6, l=6$)의 방사특성.....	114
그림 5-1 일반적인 점 소스 구조.....	117
그림 5-2 점 소스 방식의 진공 챔버.....	118

그림 5-3 노즐 역할을 하는 PBN 도가니.	118
그림 5-4 물질의 증착 두께 측정 위치.	120
그림 5-5 Alpha-Step IQ.	120
그림 5-6 정지 성막 실험.	121
그림 5-7 기관에 증착된 Ag 두께.	124
그림 5-8 증착 두께에 따른 방사특성.	125
그림 5-9 방사특성.	126
그림 5-10 시뮬레이션 노즐 형상.	127
그림 5-11 노즐부터 기관까지의 거리 변화.	128
그림 5-12 노즐 위치에 따른 방사 각도 변화.	129
그림 5-13 노즐의 방사특성 계산방법 A.	132
그림 5-14 노즐의 방사특성 계산방법 B.	133
그림 5-15 방사각도에 의한 CASE1 노즐의 방사특성.	135
그림 5-16 CASE 1 노즐의 위치별 증착 두께.	136
그림 5-17 증착 형상에 의한 CASE1 노즐의 방사특성.	137
그림 5-18 CASE 1 노즐의 방사특성.	138
그림 5-19 방사각도에 의한 CASE 2 노즐의 방사특성.	138
그림 5-20 CASE 2 노즐의 위치별 증착 두께.	139
그림 5-21 증착 형상에 의한 CASE 2 노즐의 방사특성.	140
그림 5-22 CASE 2 노즐의 방사특성.	141
그림 5-23 정지 성막 실험의 방사특성 비교.	142
그림 5-24 정지 성막 실험의 방사특성 비교.	143
그림 5-25 정지 성막 실험의 방사특성 비교.	144
그림 5-26 해석적 해에 대한 방사특성 차이.	144
그림 5-27 정지 성막 실험의 방사특성 비교.	146
그림 5-28 해석적 해에 대한 방사특성 차이(RMSE/AVG).	147
그림 5-29 정지 성막 실험의 방사특성 비교.	148
그림 5-30 정지 성막 실험의 방사특성 비교.	149
그림 5-31 정지 성막 실험의 방사특성 비교.	150
그림 5-32 해석적 해에 대한 방사특성 차이.	150
그림 5-33 정지 성막 실험의 방사특성 비교.	152

그림 5-34 해석적 해에 대한 방사특성 차이(RMSE/AVG).....	152
그림 6-1 물질 잔량에 따른 노즐 길이 변화.....	153
그림 6-2 물질 잔량에 따른 노즐 길이 변화.....	154
그림 6-3 물질 잔량에 따른 증착 형상.....	155
그림 6-4 물질 잔량에 따른 균일도 변화.....	155
그림 6-5 소스 기관 거리와 옴셋에 따른 균일도 변화.....	156
그림 6-6 물질 잔량에 따른 증착 형상.....	157
그림 6-7 물질 잔량에 따른 균일도 변화.....	157
그림 6-8 노즐 형상 변화.....	158
그림 6-9 소스 형상에 따른 균일도 변화.....	159
그림 6-10 물질 잔량에 따른 증착 형상.....	160
그림 6-11 물질 잔량에 따른 균일도 변화.....	161
그림 A-1 노즐 벽면에 요철 형상 모델링.....	167
그림 A-2 CASE 1 노즐의 방사특성 시뮬레이션 결과.....	168
그림 A-3 CASE 1 노즐의 해석적 해에 대한 방사특성 차이.....	168
그림 A-4 CASE 1 노즐의 방사특성 RMSE 오차.....	169
그림 A-5 CASE 2 노즐의 방사특성 시뮬레이션 결과.....	170
그림 A-6 CASE 2 노즐의 해석적 해에 대한 방사특성 차이.....	170
그림 A-7 CASE 2 노즐의 방사특성 RMSE 오차.....	171
그림 A-8 노즐 벽면 요철부에서의 방사특성 변화.....	172
그림 A-9 벽면쪽으로 반사된 분자.....	173

표 목차

표 3-1. 노즐 길이에 따른 파라미터.....	49
표 3-2. 시뮬레이션 조건.....	51
표 3-3 원통형 노즐($r=1, l=2$) 시뮬레이션 조건.....	52
표 3-4 원통형 노즐($r=1, l=3$) 시뮬레이션 조건.....	53
표 3-5 원통형 노즐($r=1, l=4$) 시뮬레이션 조건.....	53
표 3-6 원통형 노즐($r=1, l=6$) 시뮬레이션 조건.....	54
표 3-7 원통형 노즐($r=1, l=2$)의 해석적 해에 대한 RMSE.....	56
표 3-8 원통형 노즐($r=1, l=2$)의 방사특성 데이터.....	59
표 3-9 원통형 노즐($r=1, l=3$)의 해석적 해에 대한 RMSE.....	61
표 3-10 원통형 노즐($r=1, l=3$)의 방사특성 데이터.....	63
표 3-11 원통형 노즐($r=1, l=4$)의 해석적 해에 대한 RMSE.....	65
표 3-12 원통형 노즐($r=1, l=4$)의 방사특성 데이터.....	67
표 3-13 원통형 노즐($r=1, l=6$)의 해석적 해에 대한 RMSE.....	69
표 3-14 원통형 노즐($r=1, l=6$)의 방사특성 데이터.....	71
표 4-1. 노즐 길이에 따른 파라미터.....	102
표 4-2 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=2, l=6$) 시뮬레이션 조건.....	105
표 4-3 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=4, l=6$) 시뮬레이션 조건.....	107
표 4-4 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=6, l=6$) 시뮬레이션 조건.....	107
표 4-5 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=2, l=6$)의 해석적 해에 대한 RMSE.....	109
표 4-6 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=2, l=6$)의 방사특성 데이터.....	111
표 4-7 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=4, l=6$)의 해석적 해에 대한 RMSE.....	113
표 4-8 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=4, l=6$)의 방사특성 데이터.....	115
표 4-9 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=6, l=6$)의 해석적 해에 대한 RMSE.....	117
표 4-10 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=6, l=6$)의 방사특성 데이터.....	119
표 5-1 실험 조건.....	124
표 5-2 기관에 증착된 Ag 두께.....	126

표 5-3 CASE 1 ($r=35.5$, $l=109.7$).....	133
표 5-4 CASE 2 ($r=35.5$, $l=83.2$).....	134
표 6-1 노즐의 반지름과 길이에 따른 소스 부피.....	159

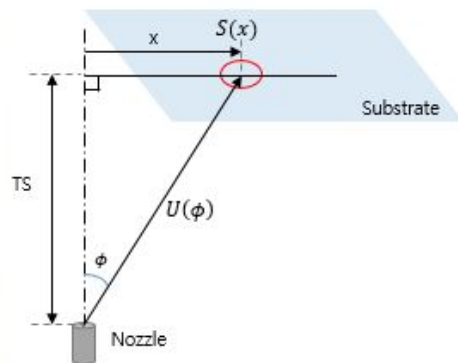
제 1 장. 서론

1.1 연구 배경

OLED 는 다층의 박막을 고진공 챔버에서 열증착 방식의 소스를 사용해 증착을 한다. 이때 노즐의 배열 및 이송 방향에 따라 선형(Linear) 소스와 점(Point) 소스로 나눌 수 있다. 선형 소스는 일반적으로 복수개의 노즐이 나란하게 배열되고 소스와 기판이 상대적인 직선운동을 한다. 점 소스는 한 개의 노즐을 사용하고 기판이 점 소스에 대해서 회전운동을 하는 방식을 사용한다. 이런 구조의 소스에서 방출된 물질이 기판에 균일하게 쌓이도록 하기 위해서는 노즐에서 방출되는 물질의 방사특성을 정확하게 아는게 중요하다. 방사특성을 정확하게 알아야만 각각의 노즐의 크기, 노즐의 간격, 기판과 노즐 사이의 거리를 최적화 할 수 있다.



<고진공 챔버>



<점 소스 구조>

그림 1-1 열증착(Thermal Evaporation) 소스 구조

이때 노즐의 방사특성을 간단하게 나타내는 방법으로는

코사인(Cosine)의 N 제곱 형태로 나타내는 코사인 지수 함수를 사용할 수 있다. 누센의 코사인 법칙(Knudsen's Cosine Law)에 따르면 어떠한 공간에 얇은 오리피스 형태의 노즐이 연결된 경우 노즐에서 방출되는 분자는 코사인 함수의 형태($\cos\theta$)를 보인다. 이때 얇은 오리피스 형태의 노즐이 아니라 길이를 갖는 원통형 노즐이 연결 되는 경우 코사인 지수 함수의 형태($\cos^n\theta$)와 유사한 형태로 분자가 방출된다. 이러한 특징을 이용하여 노즐의 방사특성을 간단하게 모델링하는 경우 코사인 지수 함수를 사용한다.

하지만 실제 원통형 노즐의 방사특성은 코사인 지수 형태와 비슷하기는 하지만 정확하게 일치하지는 않기 때문에 코사인 지수 함수 모델을 사용하는 경우 실제 기관 쌓이는 두께를 정확하게 계산할 수 없다. 이러한 문제를 극복하기 위해서는 노즐의 방사특성을 좀 더 정확하게 나타내는 모델이 필요하다.

1.2 연구 방향

노즐의 방사특성은 노즐의 형상에 직접적인 영향을 받는다. 원통형 노즐의 경우 노즐 입구의 반지름, 노즐의 길이에 따라 방사특성이 변한다. 원뿔형 노즐의 경우 노즐 입구의 반지름, 노즐의 길이, 노즐 벽면의 경사도(taper angle)에 따라 방사특성이 변한다.

이러한 노즐의 방사특성을 정확하게 계산하기 위한 방법들이 많이 연구되었다. 대표적인 방법으로 수치적분법이 있다. 노즐 입구로 입사된 분자는 크게 두가지 경로를 통해 노즐 출구로 방출된다. 첫째로 노즐 입구에서 노즐 출구로 노즐 벽면과 충돌하지 않고 직접 방출되는 분자와, 노즐 벽면에 충돌한 후 노즐 출구로 방출되는 분자로 나눌 수 있다. 이때 벽면에서의 충돌은 1 회만 충돌할 수도 있고, 1 회 이상 충돌할 수도 있다. 수치적분법은 이러한 모든 분자의 이동 경로에 해당 경로로 이동할 확률을 곱해 노즐 출구로 방출되는 분자의 방향 분포를 계산하는 방법이다. 노즐의 기하학적인 형상에 따라 노즐의 이동 경로에 대한 확률을 각각 계산해야하기 때문에 비교적 간단한 형상인 원통형 노즐에서는 계산할 수 있지만, 노즐의 형상이 복잡해지는 경우 계산하기 어렵다.

다른 방법으로는 몬테카를로 시뮬레이션을 이용한 방법이 있다. 몬테카를로 시뮬레이션은 난수를 이용하여 함수의 값을 확률적으로 계산하는 방법이다. 노즐 입구에 실제로 입사되는 분자의 입사 분포 함수와 유사하게 입자를 발생시켜 노즐 입구에 입사시킨 후 각각의 입자가 이동하는 경로를 추적하는 방법이다. 이때 입자의 일부는 출구로 직접 방출되고, 입자의 일부는 벽면과 충돌한 후 다시 입구로 되돌아가거나 출구로 방출되고, 일부는 다시 벽면과 충돌한다. 몬테카를로

시뮬레이션은 이러한 복잡한 경로를 직접 계산하지 않고, 각각의 분자가 이동하는 방향에 벽면과의 충돌이 있을 경우에만 입자의 방향을 벽면 반사 특성에 따라 변경해주게 된다. 이러한 단순한 반복 계산을 여러 번 반복하면 노즐 출구에서 방출되는 분자의 분포 함수를 구할 수 있다. 이러한 특성 때문에 노즐의 형상이 복잡해져도 수렴하기 위한 시뮬레이션 시간만 증가할 뿐 복잡한 형상의 노즐에 대해서도 비교적 쉽게 노즐의 방사특성을 구할 수 있는 장점이 있다.

이러한 기존 방법들을 이용하면 노즐의 방사특성을 정확하게 계산할 수 있다. 하지만 기존 방법들은 노즐의 방사특성을 정확하게 나타내고 있지만 분석적 해의 형태로 나타내지 않기 때문에 노즐의 형상이 변하면 매번 동일한 계산과정을 필요로 한다. 본 연구에서는 이러한 단점을 해결할 수 있도록 특정한 근사화를 통해 노즐의 방사특성을 나타내는 해석적 해를 구하는 것을 목표로 한다.

1.3 연구 내용

본 연구에서는 일반적으로 많이 사용되는 원통형 노즐과 원뿔형 노즐의 방사특성을 나타내는 수학적 모델을 만들고 기존 모델들과 비교하였다. 이러한 목적을 달성하기 위해 노즐의 출구에서 방출되는 분자들이 노즐 출구 중심의 한 점(point)에서 방출된다고 가정하였다. 일반적으로 열증착 장비에서 사용하는 소스-기관 구조는 노즐의 크기 대비 기관까지의 거리가 수십배 이상 크기 때문에 노즐 출구에서의 분자의 방출을 한점에서 근사화하더라도 기관 위치에서 증착 형상의 계산 결과에 거의 영향을 미치지 않는다.

분자 유동 상태에서 노즐 내부 벽면에 분자가 충돌하는 경우 반사되는 분자의 방향은 코사인 법칙($U(\theta) = \cos \theta$)을 따른다. 즉 벽면에 입사되는 방향과 상관없이 벽면에 충돌한 분자는 모든 방향으로 동일한 확률을 가지고 반사된다. 이러한 특성은 벽면의 특정한 점에서 반사되는 분자의 방향 분포 함수를 구할 때 입사되는 분자의 방향을 고려할 필요가 없이 입사되는 분자의 개수만 고려하면 되도록 해준다.

이와 같이 노즐 출구에서 방출되는 분자의 위치에 대한 근사화와 노즐 내부에서 충돌 후 반사되는 분자의 방향에 관한 특성을 사용하여 노즐 형상에 따른 방사특성 함수를 계산하였다. 이러한 방식으로 구해진 노즐의 방사특성 함수를 검증하기 위해 실제 증착 실험을 통해 구한 노즐의 방사특성 결과와 몬테카를로 시뮬레이션을 통해 구해진 노즐의 방사특성 결과와 비교하여 본 연구를 통해 만든 방사특성 모델의 유효성을 검증하였다.

앞서 설명한 수치적분법과 몬테카를로 시뮬레이션 방법은 노즐의 방사특성 결과값이 해석적 해(analytic solution) 형태가 아닌 특정한

노즐 형상에 대한 수치적 해(numerical solution)로 되어 있기 때문에 노즐의 형상이 변경되면 노즐의 방사특성을 다시 구하는 과정이 필요하다. 본 연구에서 구한 수학적 모델은 노즐의 방사특성 함수가 노즐의 형상(노즐 입구의 반지름, 길이, Taper Angle)에 관한 정보를 포함한 함수형태로 되어있기 때문에 노즐 형상이 변경되도 노즐의 방사특성을 새로 구하는 과정을 필요로 하지 않는다. 이러한 특성을 이용하여 점(Point) 증발원을 사용하는 소스-기관 구조에서 노즐 형상 변화에 따른 기관에서의 균일도 최적화 작업을 수행하여 본 연구에서 만든 수학적 모델의 유용성을 보였다.

제 2 장. 배경이론

2.1 노즐의 방사특성

누센의 코사인 법칙(Knudsen's Cosine Law)에 따르면 벽면에 입사된 분자가 벽면에 충돌한 후 반사 될 때 입사된 분자의 방향에 무관하게 모든 방향으로 동일한 확률을 갖는다. 이때 벽면에 수직한 방향과 이루는 각을 반사각이라고 하면 반사특성 분포 함수는 반사각(θ)에 관한 함수로 나타낼 수 있고, 이때 반사특성 함수는 코사인 함수의 모양과 동일하다고 알려져 있다.

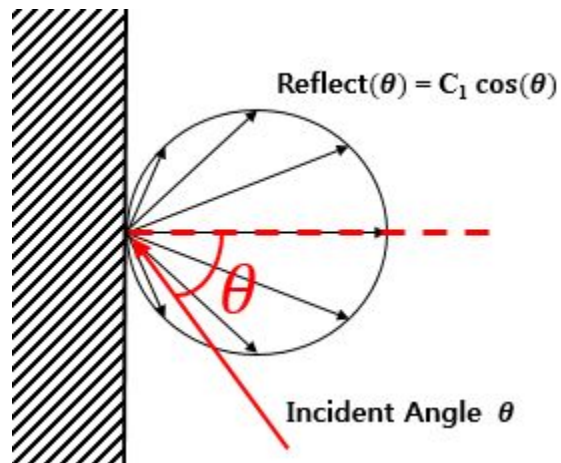


그림 2-1 누센(Knudsen)의 코사인 법칙

이러한 누센의 코사인 법칙을 따르는 밀폐된 공간에 아주 얇고 작은 오리피스가 연결되어 있는 경우 오리피스 밖으로 방출되는 물질의 '방사특성' 함수는 오리피스의 수직방향과 이루는 방출각도(θ)에 관한 함수로 나타낼 수 있는데, 이 함수는 벽면에서 충돌 후 반사되는 반사특성함수와 동일하게 $U(\theta) = A \cos \theta$ 로 나타낼 수 있다. 하지만

일반적으로 많이 사용되는 열증착 장비 소스에서 사용되는 노즐은 길이 방향으로 길쭉한 원통형태를 갖는다. 이러한 길이방향으로 길쭉한 노즐 구조에서는 노즐의 내부를 이동하는 분자에 Beaming Effect 가 생겨 코사인 함수($\text{Cos } \theta$)보다 수직방향 밀도가 높은 코사인 N 승 함수($\text{Cos}^n \theta$)와 유사한 형태가 된다. 실제 노즐에서 방출되는 노즐의 방사특성 함수는 정확하게 코사인 N 승 함수와 동일하지 않지만, 수식이 간단하기 때문에 노즐의 방사특성을 간단하게 나타내는 경우 노즐의 실제 방사특성 함수와 가장 유사한 N 값을 사용해서 노즐의 방사특성을 나타내는 경우가 많다.

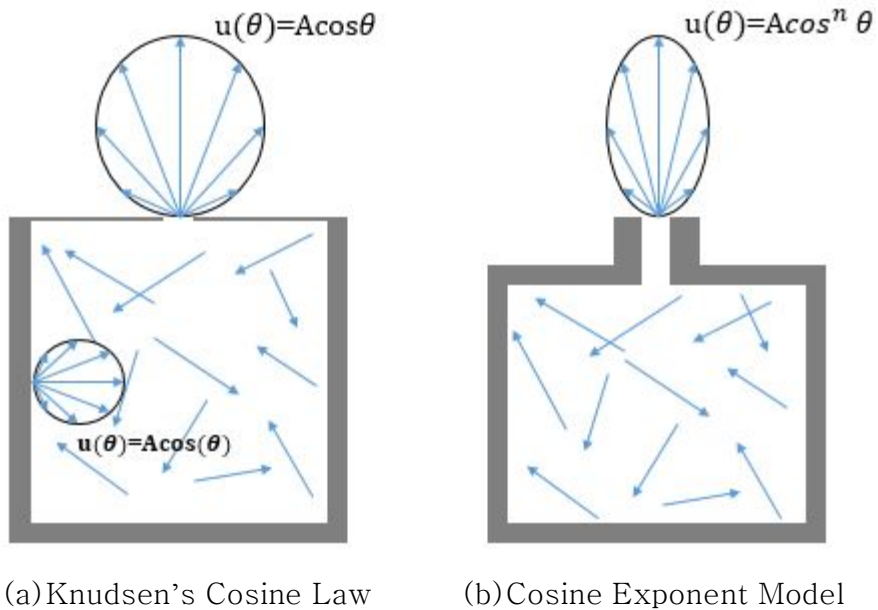


그림 2-2 노즐의 방사특성

2.2 노즐의 방사특성에 따른 증착 프로파일 계산

노즐의 방사특성에 따른 증착 프로파일은 다음과 같은 방법으로 계산할 수 있다. 노즐에서 방출되는 물질의 방사특성이 코사인 지수함수의 형태를 따른다고하면 다음과 같이 노즐의 방사특성 함수를 나타낼 수 있다. 이때 θ 는 노즐 중심과 물질의 방출 방향이 이루는 각도이다..



그림 2-3 노즐에서 방출되는 물질의 경로

Angular Distribution of Nozzle :

$$u(\theta) = A \cos^n \theta \quad (2.1)$$

노즐에서 거리 L , 방출각도 θ 만큼 떨어진 기관의 미소면적 ds 에 쌓이는 물질의 양은 다음과 같이 계산할 수 있다. 이때 $d\psi$ 는 노즐 중심에서 미소면적 ds 가 이루는 면적각(solid angle)이다.

$$t(\theta) = u(\theta) d\psi \frac{1}{ds} \quad (2.2)$$

미소면적 ds 는 노즐 중심에서 거리 L 만큼 떨어진 위치에서 면적각 $d\psi$ 가 만드는 면적을 θ 만큼 기울여서 투영된 면적으로 다음과 같은 관계식을 통해 구할 수 있다.

$$ds = L^2 d\psi \frac{1}{\cos\theta} \quad (2.3)$$

$$d\psi \frac{1}{ds} = \frac{\cos\theta}{L^2} \quad (2.4)$$

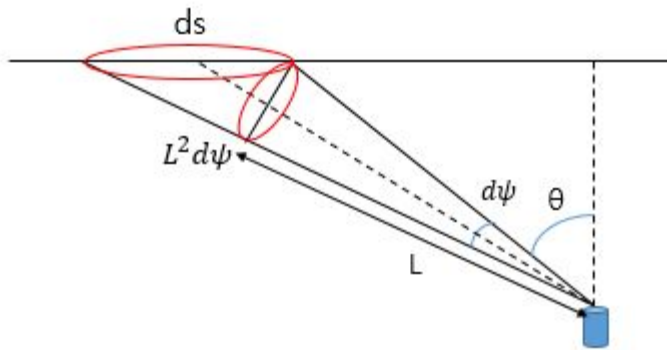


그림 2-4 노즐에서 방출된 물질이 만드는 면적각

식 (2.2)와 식 (2.4)를 (2.1)에 대입하면 다음과 같이 θ 방향의 기판 위치에 증착되는 물질의 두께를 구할 수 있다.

$$t(\theta) = A \cos^n \theta \frac{\cos\theta}{L^2} \quad (2.5)$$

2.3 수치적분법

2.3.1 수치적분법의 계산 방법

노즐 입구에 입사되는 분자는 크게 두가지 방법을 통해 노즐 출구로 방출된다. 첫번째로 노즐 입구로 입사된 분자가 벽면에 충돌하지 않고 노즐 출구로 바로 방출되는 경우이다. 다음으로 노즐 벽면에 충돌한 후 반사되서 노즐 출구방향으로 방출되는 경우이다. 이때 벽면에서 반사된 분자의 일부는 노즐 입구로 되돌아 가고 일부는 다시 벽면에 충돌할 수 있다. 이때 특정한 한 점에서 분자의 밀도와 특정한 방향으로 분자가 방출 혹은 반사될 확률에 면적을 곱해서 해당 지점에서 해당 방향으로 나가는 물질의 밀도를 계산할 수 있다.

$\begin{aligned} & \text{벽면의 한 점에서 A방향으로 방출되는 분자의 수} \\ & = \text{해당 위치에서 분자의 밀도} \times \text{A방향으로 방출될 확률} \times \text{면적} \end{aligned}$
--

이러한 계산을 위해서는 다음과 같은 몇가지 가정이 필요하다.

첫째, 노즐 내부에서 분자간 충돌은 없다고 가정한다.

둘째, 노즐 입구로 입사되는 분자는 코사인 법칙($\cos \theta$)을 따른다.

셋째, 노즐 벽면에서 충돌한 분자는 입사된 방향과 상관없이 코사인 법칙을 따른다.

넷째, 노즐 벽면에 충돌한 분자는 흡수되지 않고 그대로 반사된다.

다섯째, 노즐 출구로 한번 방출된 분자는 다시 역류해서 노즐 내부로 들어오지 않는다.

이러한 일반적인 분자 유동 가정을 통해 노즐 입구에 코사인 법칙을

따르는 분자들이 입사되는 경우 노즐 출구로 방출되는 분자들의 방향 분포를 계산할 수 있다.

2.3.2 노즐의 벽면에 충돌하지 않고 통과하는 분자^[5]

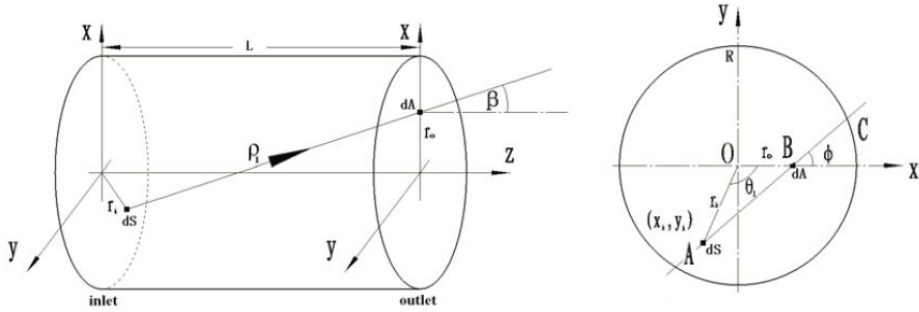


그림 2-5 노즐 입구에 입사된 분자가 노즐 출구로 방출되는 경로

그림 2-5 는 노즐 입구의 미소면적 dS 로 입사된 분자가 노즐 출구의 미소면적 dA 로 벽면 충돌없이 바로 방출되는 분자의 경로를 나타낸 그림이다. L 는 노즐의 길이, R 은 노즐의 반경, r_i 는 노즐 입구의 중심에서 dS 미소면적을 향하는 벡터, r_o 는 노즐 출구의 중심에서 dA 미소면적을 향하는 벡터이다. β 는 노즐 중심축에 대해서 분자의 방출 방향이 만드는 각도이다. θ_1 는 XY 평면에 투영된 벡터 r_i 와 벡터 r_o 가 만드는 각도, ϕ 는 선 AB 가 X 축과 만드는 각도이다. d 는 노즐의 직경이다. ρ_1 는 dS 에서 dA 로 향하는 벡터이다.

ρ_1 은 다음과 같이 구할 수 있다.

$$\rho_1^2 = L^2 + \overline{AB}^2 \quad (2.6)$$

제 2 코사인법칙에 따라 선 AB 은 다음과 같이 구할 수 있다.

$$\overline{AB}^2 = r_i^2 + r_o^2 - 2r_i r_o \cos\theta_1 \quad (2.7)$$

식 (2.7)을 식 (2.6)에 대입하면 ρ_1 는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\rho_1^2 = L^2 + r_i^2 + r_o^2 - 2r_i r_o \cos\theta_1 \quad (2.8)$$

코사인 법칙에 따라 노즐 입구의 미소면적 dS 에 입사된 분자 중 노즐 출구의 미소면적 dA 로 향하는 분자의 수는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$dN_{dS-dA}(r_o) = \gamma dS \frac{1}{\pi} \cos^2\beta \frac{1}{\rho_1^2} dA \quad (2.9)$$

여기서 γ 는 노즐입구로 입사되는 분자의 밀도이다. 노즐 입구에서의 분자의 밀도는 노즐 입구로 단위시간당 들어오는 분자의 수를 의미하고, 노즐 벽면에서의 분자의 밀도는 해당 위치에 충돌하는 분자의 수이면서 해당 위치에서 반사되서 나오는 분자의 수를 의미한다. 입구의 미소면적 dS 는 다음과 같이 나타낼 수 있고, 식 (2.9)에 대입하면 식 (2.11)과 같이 정리할 수 있다.

$$dS = r_i dr_i d\theta_1 \quad (2.10)$$

$$dN_{dS-dA}(r_o) = \gamma \frac{1}{\pi} \frac{L^2}{\rho_1^4} r_i dr_i d\theta_1 dA \quad (2.11)$$

식 (2.11)은 입구의 미소면적 dS 에서 출구의 미소면적 dA 로 방출되는 분자의 수를 나타낸 식이다. 식 (2.11)을 dr_i 와 $d\theta_1$ 에 대해서 적분하면 입구 전체 면적 S 에서 출구 미소면적 dA 로 방출되는 분자의 수를 나타내는 식 (2.12)를 구할 수 있다.

$$dN_{S-dA}(r_o) = \frac{\gamma L^2}{\pi} dA \int_0^R dr_i \int_0^{2\pi} \frac{r_i}{\rho_1^4} d\theta_1$$

(2.12)

2.3.3 노즐의 벽면에 충돌한 후 출구로 방출되는 분자^[5]

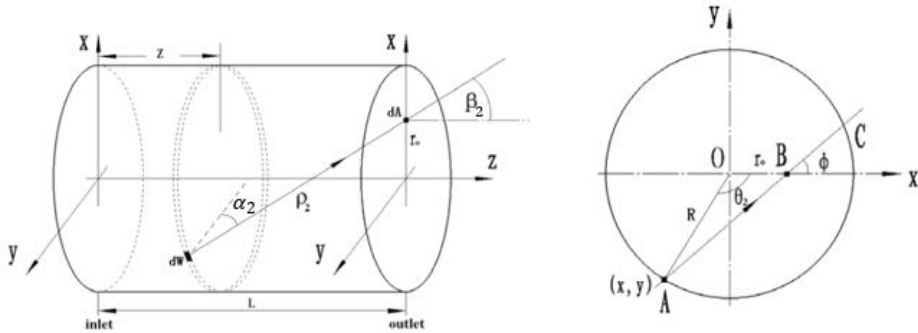


그림 2-6 노즐 벽면에서 반사된 분자가 노즐 출구로 방출되는 경로

그림 (2-6)은 벽면의 미소면적 dW 에서 방출된 분자가 노즐 출구의 미소전적 dA 로 방출되는 경로를 나타낸 그림이다. z 는 노즐 입구의 중심에서 미소면적 dW 까지의 z 방향 거리를 의미한다. θ_2 는 노즐 중심에서 dW 방향과 r_o 방향이 이루는 각을 의미한다. ρ_2 는 dW 에서 dA 로 향하는 벡터이다. 앞서처럼 피타고라스 정리와 제 2 코사인 법칙을 사용하면 ρ_2 는 식 (2.13)과 같이 나타낼 수 있다. α_2 는 미소면적 dW 에 수직인 방향과 ρ_2 벡터가 이루는 각으로 벽면에서 코사인 법칙에 따라 반사된 분자 중 ρ_2 방향으로 향하는 분자의 양에 영향을 주는 각도가 된다.

$$\rho_2^2 = (L - z)^2 + R^2 + r_o^2 - 2Rr_o \cos\theta_2 \quad (2.13)$$

코사인 법칙에 따라 노즐 벽면의 미소면적 dW 에 반사된 분자 중 노즐 출구의 미소면적 dA 로 향하는 분자의 수는 다음과 같이 나타낼

수 있다. $\gamma_2(z)$ 는 노즐 입구에서 z 만큼 떨어진 벽면에서의 분자 밀도를 의미한다.

$$dN_{dW-dA}(z, r_o) = \gamma_2(z) dW \frac{1}{\pi} \cos\alpha_2 \cos\beta_2 \frac{1}{\rho_2^2} dA \quad (2.14)$$

ρ_2 를 대각선으로 하는 삼각형의 의해 β_2 를 표현하고, AB의 길이를 나타내는 방법에 의해 α_2 는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\cos\beta_2 = (L - z)/\rho_2 \quad (2.15)$$

$$\cos\alpha_2 = \sqrt{R^2 + r_o^2 - 2Rr_o \cos\theta_2}/\rho_2 \quad (2.16)$$

미소면적 dW 는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$dW = R d\theta_2 dz \quad (2.17)$$

식 (2.15)과 식 (2.16)을 식 (2.14)에 대입하면 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\begin{aligned}
dN_{dW-dA}(r_o) = & \\
& \gamma_2(z) \frac{1}{\pi} \frac{\sqrt{R^2 + r_o^2 - 2Rr_o \cos\theta_2}}{\rho_2} \\
& \times \frac{(L-z)}{\rho_2} \frac{1}{\rho_2^2} R d\theta_2 dz dA
\end{aligned}
\tag{2.18}$$

식 (2.18)을 dz 와 $d\theta_2$ 에 대해서 적분을 하면 벽면 전체의 면적 W 에서 출구 미소면적 dA 로 방출되는 분자의 수를 나타내는 식 (2.19)를 구할 수 있다

$$\begin{aligned}
dN_{W-dA}(r_o) = & \\
& \frac{R}{\pi} dA \int_0^L \gamma_2(z) dz \\
& \times \int_0^{2\pi} \frac{\sqrt{R^2 + r_o^2 - 2Rr_o \cos\theta_2} (L-z)}{\rho_2^4} d\theta_2
\end{aligned}
\tag{2.19}$$

2.4 몬테카를로 시뮬레이션

2.4.1 몬테카를로 시뮬레이션 방법

몬테카를로 시뮬레이션은 난수를 이용하여 함수의 값을 확률적으로 계산을 계산하는 방법이다. 변수의 관계가 확실하여 결과값을 정확하게 계산할 수 있는 확정적 모델(deterministic model)은 일반적으로 분석적 해를 찾을 수 있다. 하지만 결과를 정확하게 예측할 수 없는 확률 모델(probability model)은 일반적으로 분석적인 해를 찾는 것이 불가능하다. 이 경우 수치적인 방법으로 해를 찾아야하는데, 이러한 방법 중에 난수를 이용하여 반복적인 계산으로 수치적 해를 찾는 방법을 몬테카를로 시뮬레이션이라고 한다. 몬테카를로 시뮬레이션은 꼭 분석적 해를 구할 수 없는 확률 모델뿐만 아니라 분석적 해를 갖는 확정적 모델에서도 사용할 수 있다. 바로 다음으로 인용한 논문^[1]과 본 연구에서 구한 분석적 해를 검증하기 위해서 사용한 몬테카를로 시뮬레이션이 분석적 해를 갖는 확정적 모델에서의 몬테카를로 시뮬레이션을 수행한 경우라고 볼 수 있다.

2.4.2 몬테카를로 시뮬레이션을 통한 노즐의 방사특성 계산^[1]

몬테카를로 시뮬레이션을 이용해서 노즐의 방사특성을 구하기 위해서는 노즐 입구의 분자 입사 조건, 노즐 벽면에서의 분자 반사 특성, 노즐 내부에서 분자간 충돌 여부, 분자간 충돌을 하는 경우 충돌 모델 등을 설정해야한다. 노즐 내부의 분자 밀도가 낮아서 분자 유동 조건인 경우 노즐 내부에서의 충돌은 없다고 가정할 수 있기 때문에, 노즐 입구의 분자 입사 조건과 노즐 벽면에서의 분자 반사 특성만 결정해주면 된다. 다음에 인용한 논문에서도 노즐 입구의 분자 입사 조건은 누센의 코사인 법칙에 따라서 입사된다고 가정하고, 입자가 노즐 내부 벽면에서 충돌한 후 반사될 때 입사된 방향과 무관하게 코사인 법칙에 따라 반사된다고 가정하였다.

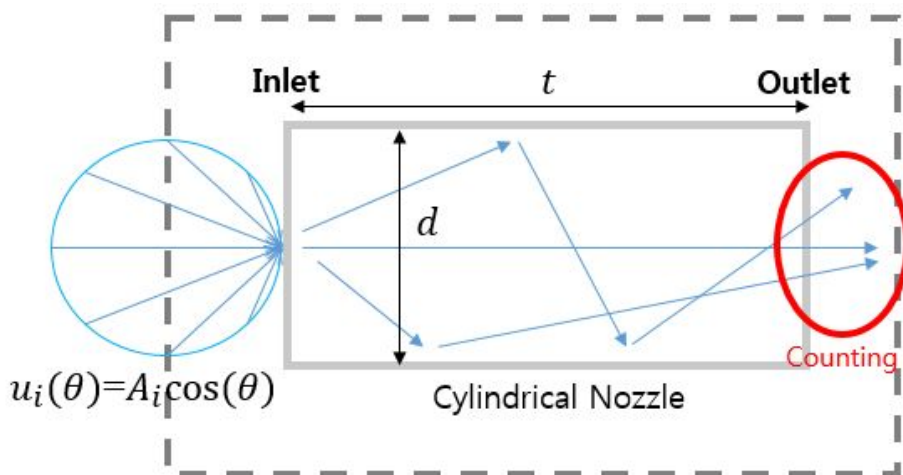


그림 2-7 몬테카를로 시뮬레이션

2.4.3 몬테카를로 시뮬레이션 결과^[1]

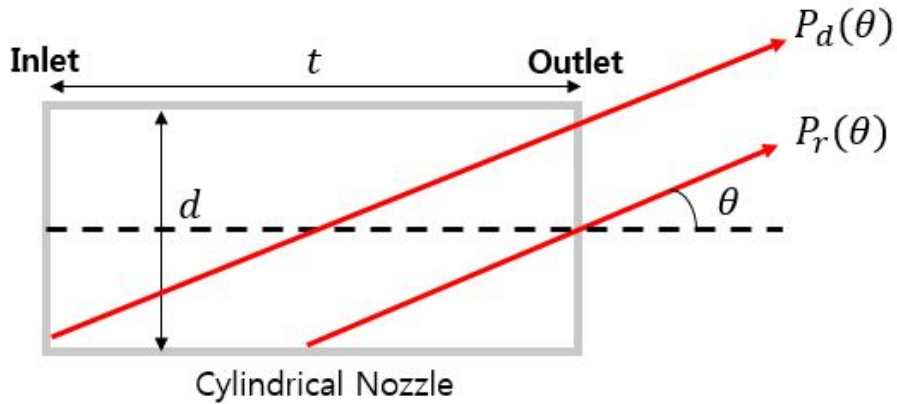


그림 2-8 노즐 출구로 이동하는 분자의 경로

노즐 입구에서 방출된 분자 중 일부는 노즐 출구로 직접 방출하고, 일부는 벽면에 반사된 후 노즐 출구로 방출된다. $P_d(\theta)$ 는 노즐 입구에서 노즐 출구로 직접 방출된 분자 중에 노즐의 중심축에 대해서 θ 만큼 기울어져서 방출되는 분자를 나타내고, $P_r(\theta)$ 은 노즐 벽면에서 충돌한 후 노즐 출구로 방출된 분자 중에 노즐의 중심축에 대해서 θ 만큼 기울어져서 방출되는 분자를 나타낸다. 노즐의 전체의 방사특성을 나타내는 $P(\theta)$ 는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$P(\theta) = P_d(\theta) + P_r(\theta) \quad (2.20)$$

몬테카를로 시뮬레이션 결과는 다음과 같다. $\cos \theta$ 가 1에 가까운, 즉 θ 가 0° 에 가까운 노즐의 중심축에 가까운 방향에서는 노즐 입구에서 노즐 출구로 직접 이동하는 분자 $P_d(\theta)$ 가 존재한다. 하지만 θ 가 점점 커지면서 노즐 입구에서 출구로 직접 이동하는 분자는 점점 사라지고,

노즐 벽면에서 반사된 후 노즐 출구로 이동하는 분자만 남게된다.

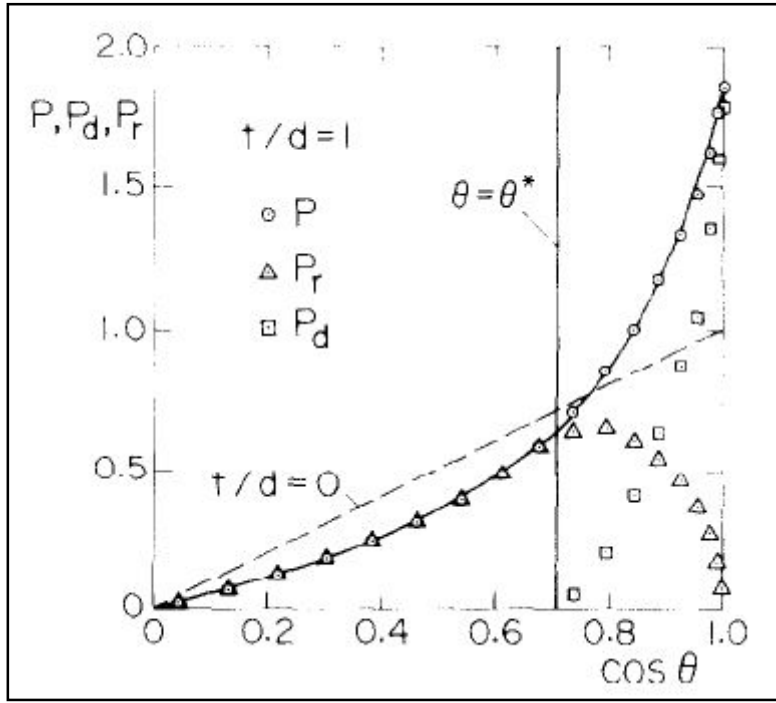


그림 2-9 몬테카를로 시뮬레이션 결과

인용한 논문의 저자는 몬테카를로 시뮬레이션 결과를 다음과 같은 형태의 식으로 근사화 하였다. θ^* 는 노즐 출구방향에서 바라봤을 때 노즐 입구가 완전히 가려지는 각도를 의미한다. 위 그래프의 점은 몬테카를로 시뮬레이션의 결과 값이고, 실선은 아래 근사식을 나타낸 선이다.

$$P(\theta) = A_1 \cos \theta + A_2 \cos^2 \theta + A_3 \cos^3 \theta$$

$$(\cos \theta \leq \cos \theta^*) \quad (2.21)$$

$$P(\theta) = B \left[\left(\frac{\cos\theta}{\cos\theta^*} \right)^\alpha - 1 \right] + P^* \quad (\cos\theta \geq \cos\theta^*) \quad (2.22)$$

제 3 장. 원통형 노즐의 방사특성

3.1 원통형 노즐의 방사특성 계산

3.1.1 방사특성 계산을 위한 근사화

본 연구에서는 노즐의 기하학적인 형상에 따라 노즐 출구로 방출되는 입자의 방사특성을 계산하였다. 앞에서 설명한 수치적분법에서 계산한 방법과 유사하게 노즐의 입구에서 노즐 출구로 방출되는 입자와 노즐 벽면에서 반사되서 노즐 출구로 방출되는 입자로 나뉘서 계산을 하였다. 하지만 수치적분법의 계산은 노즐 입구의 모든 위치와 노즐 벽면의 모든 위치에서 노즐 출구의 모든 위치로 방출되는 분자의 모든 경로를 수치적인 방법으로 각각 계산하는 방법을 사용했기 때문에 결과값이 해석적 해(analytical solution)가 아닌 수치적 해(numerical solution)의 형태였다. 비슷하게 몬테카를로 시뮬레이션의 방법으로 구한 노즐의 방사특성도 수치적 해의 형태로 표현된다.

인용한 논문^[1]에서는 몬테카를로 시뮬레이션의 결과를 해석적 해의 형태로 나타내기 위해서 식 (2.21)과 식 (2.22)와 같이 결과값을 근사화하였다. 이러한 근사화는 실제 데이터와 오차가 클 수 있다. 다음은 이러한 차이점을 보여주기 위해 본 연구에서 구한 해석적 해의 방사특성과 인용한 논문의 저자 'K Nanbu' 가 제시한 근사 함수를 비교한 그래프이다. 몬테카를로 시뮬레이션의 결과는 식 (2.21)과 식 (2.22)를 사용하였고, 적분 모델의 결과는 식 (3.16)과 식 (3.24)를 사용하였다.

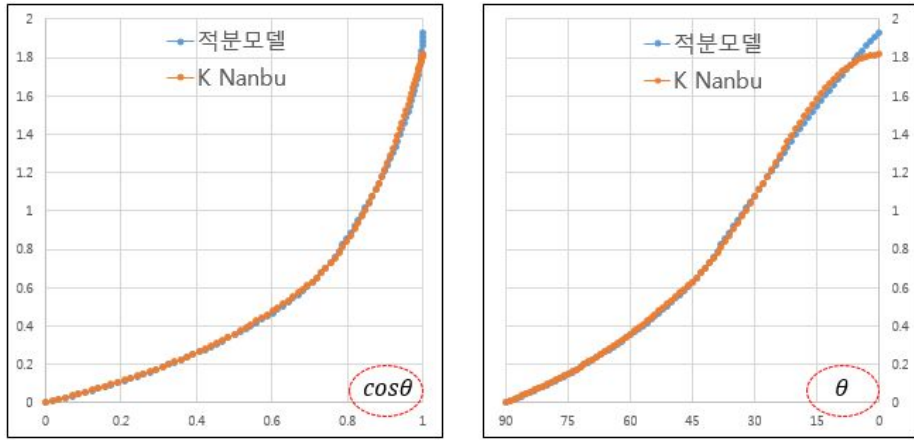


그림 3-1 적분 모델과 몬테카를로 시뮬레이션 근사 함수 비교

x 축을 $\cos \theta$ 로 나타낸 왼쪽 그림은 대부분의 영역에서 일치하는 것처럼 보이지만, x 축을 θ 로 나타낸 경우 오른쪽 그림과 같이 $\theta = 0^\circ$ 에 가까운 영역에서 오차가 크게 발생하는 것을 볼 수 있다.

이러한 문제를 극복하기 위해 본 연구에서는 수치적 해를 구한 후 그에 대한 근사화 함수를 만드는 대신 처음부터 해석적 해를 구하기 위해서 노즐 출구면 전체에서 방출되는 물질의 방출을 노즐 출구의 중심 한점에서 방출된다고 근사화 하였다.

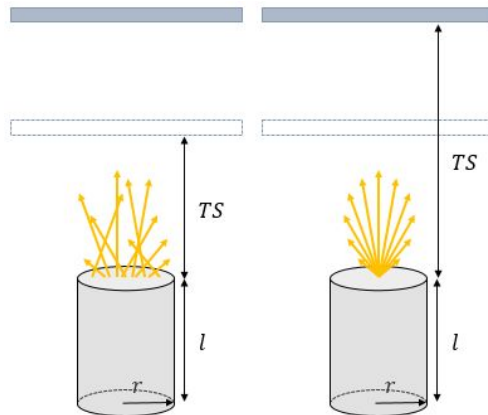


그림 3-2 노즐 출구에서 방출되는 분자

실제 노즐에서 방출되는 분자는 그림 3-2 의 왼쪽과 같이 노즐 출구 면적 전체에서 모든 방향으로 방출되지만, 오른쪽 그림과 같이 모든 분자가 노즐 출구 면의 중심에서 방출된다고 근사화하였다. 이러한 근사화를 사용하는 경우 실제 증착된 물질의 프로파일을 계산하는 위치가 노즐에서 가까운 경우 실제 물질의 프로파일과 오차가 커질 수 있다. 하지만 일반적인 열증착 공정에서 사용하는 소스와 기관(Substrate)사이의 거리는 노즐의 크기 대비 최소 수십배에서 수백배에 이른다. 그렇기 때문에 노즐 출구 면적을 한점으로 근사화해도 실제 사용하는 측면에서는 문제가 없을 것으로 판단된다.

3.1.2 원통형 노즐의 방사특성 계산 방법

노즐 출구로 방출되는 분자는 크게 둘로 나눌 수 있다. 첫째로 노즐 입구에서 입사된 분자가 벽면과 충돌하지 않고 출구로 직접 방출되는 분자, 두번째로 노즐 벽면에 충돌한 후 반사되어 노즐 출구 방향으로 방출되는 분자가 있다. 각각의 분자의 수는 다음과 같은 방법으로 구할 수 있다.

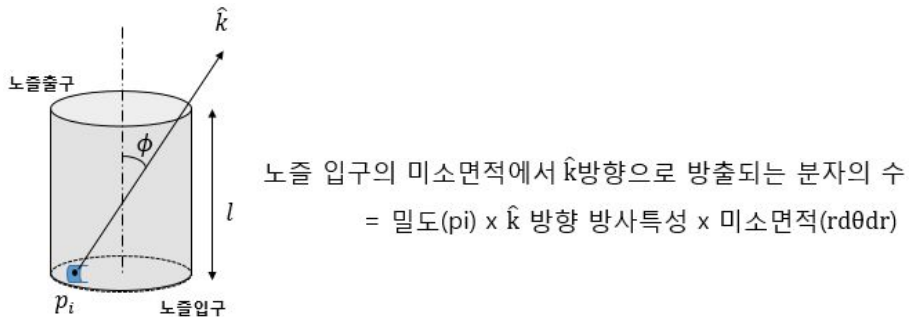
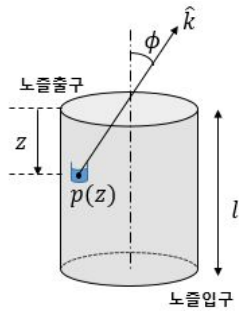


그림 3-3 노즐 입구에서 k 방향으로 방출되는 분자

먼저 노즐 입구의 미소면적에서 분자의 밀도 P_i 에 k 방향 방사특성을 곱하면 k 방향으로 날아가는 분자의 수를 계산할 수 있다. 그리고 해당 미소면적을 노즐 입구 면적 전체에 대해서 적분을 하면 노즐 입구에서 k 방향으로 방출되는 분자의 총합을 알 수 있다. 이때 k 방향에서 노즐 출구를 통해 보이는 노즐 입구 면적에서 방출되는 분자만 k 방향으로 분자를 방출 할 수 있기 때문에 해당 면적에 대해서만 적분을 수행해야한다. 또 k 방향이 노즐 중심축 방향에서 벗어날수록 k 방향에서 보이는 입구의 면적이 점점 작아지기 때문에 해당 면적 변화에 대한 계산이 필요하다.



벽면의 미소면적에서 \hat{k} 방향으로 방출되는 분자의 수
 $=$ 밀도 $p(z)$ \times \hat{k} 방향 방사특성 \times 미소면적 $(rd\theta dz)$

그림 3-4 노즐 벽면에서 k 방향으로 방출되는 분자

다음으로 노즐 출구에서 z 만큼 떨어진 벽면의 미소면적에서 k 방향으로 날아가는 분자의 수는 다음과 같은 방법으로 계산할 수 있다. 해당 미소면적에서 분자 밀도 $p(z)$ 에 k 방향 방사특성을 곱하면 해당 미소면적에서 k 방향으로 날아가는 분자의 수를 계산할 수 있다. 그리고 해당 미소면적을 노즐 내부 면적에 대해서 적분을 하면 노즐 벽면에서 k 방향으로 방출되는 분자의 총합을 알 수 있다. 이때 k 방향에서 노즐 출구를 통해 보이는 노즐 내부 면적에서 방출되는 분자만 k 방향으로 분자를 방출 할 수 있기 때문에 해당 면적에 대해서만 적분을 수행해야한다.

3.1.3 노즐 벽면에 충돌 후 노즐 출구로 방출되는 분자, $\tan\phi > 2r/l$

다음은 원통형 노즐에서 노즐 벽면에 분자가 충돌 후 k 방향으로 방출되는 분자들을 나타낸 그림이다.

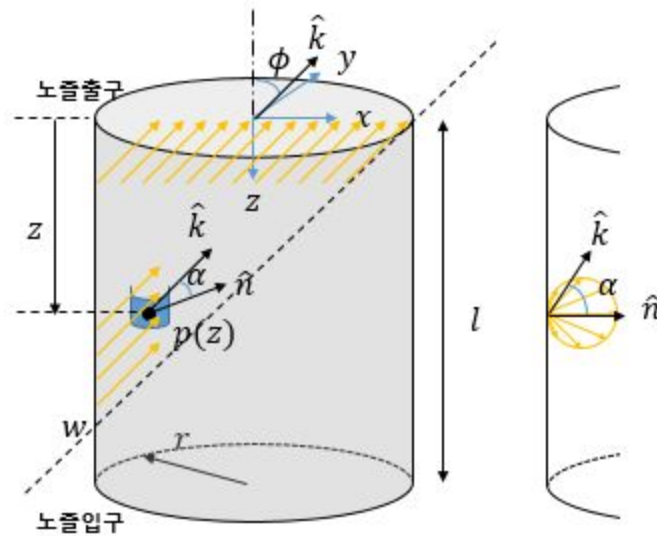


그림 3-5 노즐 벽면에서 k 방향으로 방출되는 분자들

벡터 k 는 노즐의 중심축에 대해서 ϕ 만큼 기울어진 방향을 나타내는 단위 벡터이다. 앞으로 설명되는 과정들은 벡터 k 방향으로 방출되는 분자의 수, 분자의 밀도를 구하는 과정이다.

벡터 n 은 노즐 출구에서 z 만큼 떨어진 위치의 미소면적에 수직한 방향을 나타내는 단위 벡터이다.

각도 α 는 벡터 k 와 벡터 n 의 사이 각도이다.

계산상의 편의를 위해 k 방향은 XZ 평면에 나란한 방향으로 정의하고, 벡터 n 이 X 축과 이루는 각을 θ 라고 정의하면 각각의 벡터는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\hat{k} = (\sin\phi, 0, -\cos\phi) \quad (3.1)$$

$$\hat{n} = (\cos\theta, \sin\theta, 0) \quad (3.2)$$

각도 α 를 벡터 k 와 벡터 n 이 이루는 사이 각도로 정의하였기 때문에 α 는 다음과 같이 두 벡터의 내적으로 구할 수 있다.

$$\hat{k} \circ \hat{n} = |\hat{k}| |\hat{n}| \cos\alpha = \cos\theta \sin\phi \quad (3.3)$$

벡터 k 와 벡터 n 을 단위벡터로 정의하였기 때문에 식 (3.3)은 다음과 같이 간단하게 나타낼 수 있다.

$$\cos\alpha = \cos\theta \sin\phi \quad (3.4)$$

그림 3-4 에서 설명한것처럼 미소면적에서 k 방향으로 방출되는 분자의 수는 해당 위치에서 분자의 밀도, k 방향의 방사특성, 미소면적의 넓이의 곱으로 나타낼 수 있다. 노즐 출구에서 z 만큼 떨어진 위치에서는 분자의 밀도를 $p(z)$ 함수로 나타내고, k 방향의 방사특성을 의미하는 $\cos\alpha$, 미소면적의 넓이에 해당하는 $rd\theta dz$ 를 사용하면, 노즐 출구에서 z 만큼 떨어진 위치의 미소면적에서 k 방향으로 방출되는 분자의 수는 다음과 같이 구할 수 있다.

$$p(z) \times \cos\alpha \times rd\theta dz \quad (3.5)$$

k 방향으로 날아가는 분자의 총합을 $U(\phi)$ 라고 하면, $U(\phi)$ 는 노즐 내부의 미소면적에 대해서 적분을 해주면 된다. 이때 노즐 내부 면적 전체에 대해서 적분을 하는게 아닌 k 방향으로 물질을 방출할 수 있는 면적에 대해서만 적분을 해야하는데 해당 z 방향 적분 구간은 $0 \sim w$, θ 방향 적분 구간은 $-\theta_z \sim +\theta_z$ 가 된다. 식으로 나타내면 식 (3.6)과 같다.

$$u(\phi) = \int_0^w \int_{-\theta_z}^{\theta_z} p(z) \cos\alpha r d\theta dz \quad (3.6)$$

다음은 k 방향에서 노즐 출구를 바라봤을 때 보이는 노즐 출구의 경계면으로 노즐의 원통을 자른 단면을 보여주는 그림이다.

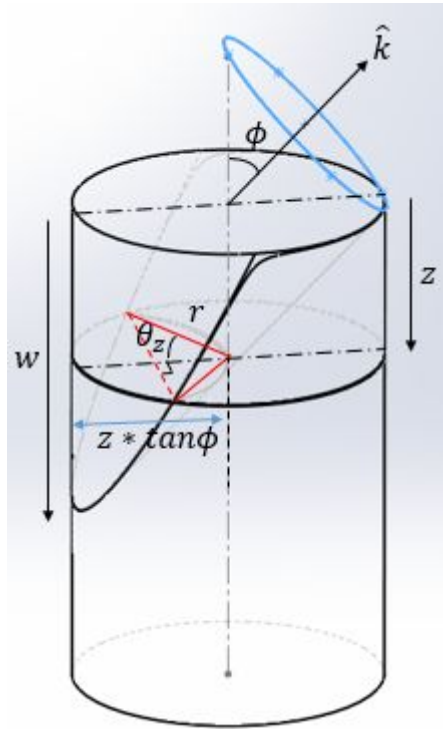


그림 3-6 분자를 방출할 수 있는 원호의 경계값

그림 3-6 에서 왼쪽 상부에 해당하는 조각의 표면 모양이 \hat{k} 방향으로 노즐 출구를 통해 바라봤을 때 보이는 원통 내부의 면적이 된다. 예를 들어 노즐 출구에서 z 만큼 떨어진 위치의 노즐 벽면에서 \hat{k} 방향으로 물질을 방출할 수 있는 위치는 θ_z 에서 $-\theta_z$ 사이에 들어가는 원호 부분이 된다. θ_z 보다 크거나 $-\theta_z$ 보다 작은 각도에서 방출된 분자는 노즐의 다른 부분에 막혀서 \hat{k} 방향으로 물질을 방출할 수 없다. 이러한 분자는 노즐 내부의 다른 벽면에 충돌하면서 다시 노즐 출구로 방출될 확률을 갖는다.

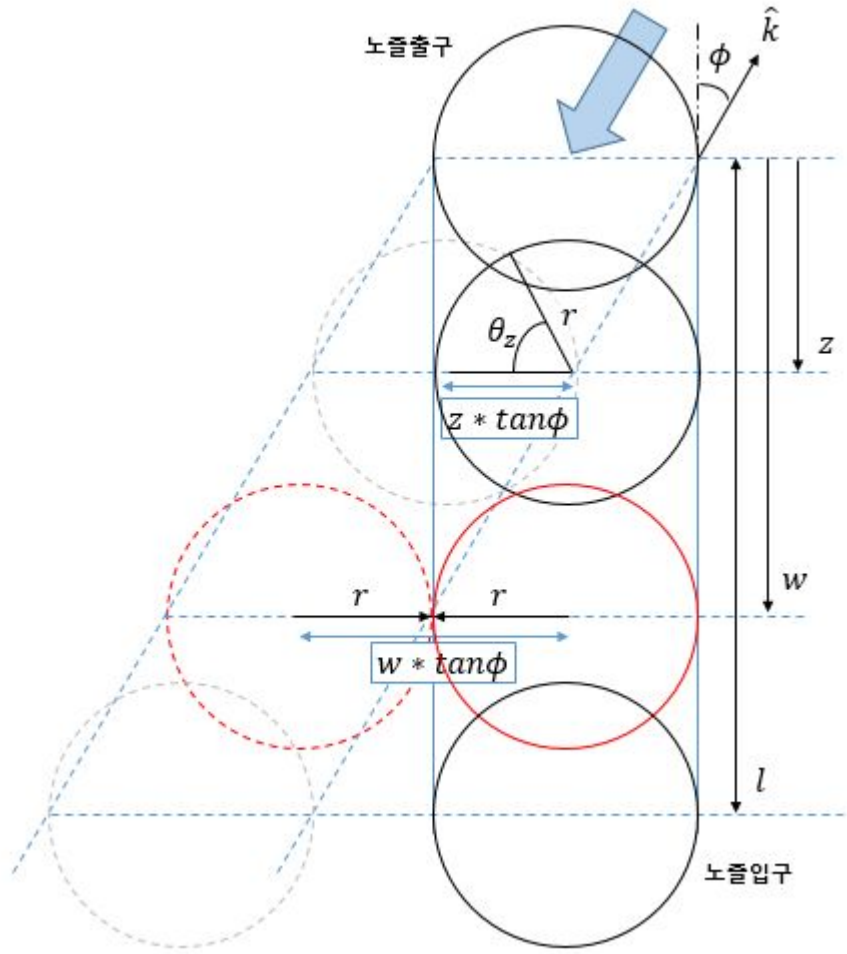


그림 3-7 원호의 경계값 변화

그림 3-7 은 노즐의 z 방향 위치에 따른 k 방향으로 물질을 방출할 수 있는 원호의 경계 값 변화를 설명하기 위해 각각의 높이에 해당하는 위치에서 노즐의 단면을 표시한 그림이다. 수직방향으로 배열된 실선으로 그려진 원은 각각의 높이에 해당하는 실제 노즐의 벽면에 해당하는 원이다. 사선으로 배열된 점선으로 그려진 원은 노즐 밖에서 $-k$ 방향으로 노즐 출구를 바라봤을 때 노즐 출구의 경계가 그리는 가상의 원통을 표시한 그림이다. 노즐의 출구에서 멀어질수록 실제 노즐에 해당하는 원통과 가상의 원통의 사이가 벌어진다. 이때 두 원통이 만나는 점이 노즐 외부에서 보이는 내부 원호의 경계가 된다.

예를 들어 노즐 출구에서 z 만큼 떨어진 위치에서 실제 노즐의 원과 가상의 원이 두 점에서 만나는데 이 두 점 사이에 해당하는 원호 부분이 실제 노즐의 원에서 노즐 외부로 물질을 방출할 수 있는 경계가 된다. 이때 해당하는 원호의 경계와 노즐 중심을 이은 선이 X 축과 이루는 각도가 θ_z 와 $-\theta_z$ 가 된다.

이때 두 원통의 중심 거리는 실제 노즐 원통 중심은 수직방향으로 고정되어 있고, 가상의 원통 중심은 z 방향 길이에 따라 $z \cdot \tan \phi$ 만큼 이동하기 때문에 중심 거리는 $z \cdot \tan \phi$ 로 나타낼 수 있다. 또 가상의 원통과 실제 원통이 이루는 교점이 만드는 각도 θ_z 는, 두 원통의 중심 거리는 $2 \cdot r \cos \theta_z$ 로 표현할 수 있다. 이러한 관계식을 사용하면 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$z \times \tan \phi = r \cos \theta_z \times 2 \quad (3.7)$$

$\tan \phi > 2r/l$ 인 경우, 노즐 출구에서 점점 멀어지면 가상의 원통과 실제 원통이 더 이상 만나지 않는 위치가 존재하는데, 이 위치가 노즐 출구에서 보이는 z 방향 최대 깊이가 된다. 이 값을 w 라고 표현하면 식 (3.7)에서 $z=w$ 인 시점에 $\theta_z = 0^\circ$ 이 되기 때문에 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$w * \tan \phi = r \times 2 \quad (3.8)$$

노즐의 방사특성을 구하기 위해 식 (3.6)에 식 (3.4)를 대입해서 적분을 해보면 다음과 같다.

$$u(\phi) = \int_0^w \int_{-\theta_z}^{\theta_z} p(z) \cos\theta \sin\phi r d\theta dz \quad (3.9)$$

$$u(\phi) = 2r \sin\phi \int_0^w p(z) \sin\theta_z dz \quad (3.10)$$

식(3.7)에 의해서 dz 는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$z = \frac{2r \cos\theta_z}{\tan\phi}, \quad dz = -\frac{2r}{\tan\phi} \sin\theta_z d\theta_z \quad (3.11)$$

식(3.11)을 식 (3.10)에 대입해서 계속 전개하면 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$u(\phi) =$$

$$2r \sin\phi \int_{\theta_0}^{\theta_w} p(z) \sin\theta_z \left(-\frac{2r}{\tan\phi}\right) \sin\theta_z d\theta_z \quad (3.12)$$

$$u(\phi) = -4r^2 \cos\phi \int_{\theta_0}^{\theta_w} p(z) \sin\theta_z^2 d\theta_z \quad (3.13)$$

노즐 내부에 충돌이 없는 경우에 노즐 내부 압력 $p(z)$ 는 다음과 같은 선형적이라고 알려져 있다.^[6]

$$p(z) = az + b \quad (3.14)$$

식 (3.13)에 식 (3.11)과 식 (3.14)를 대입하면 다음과 같이 나타낼 수 있다.

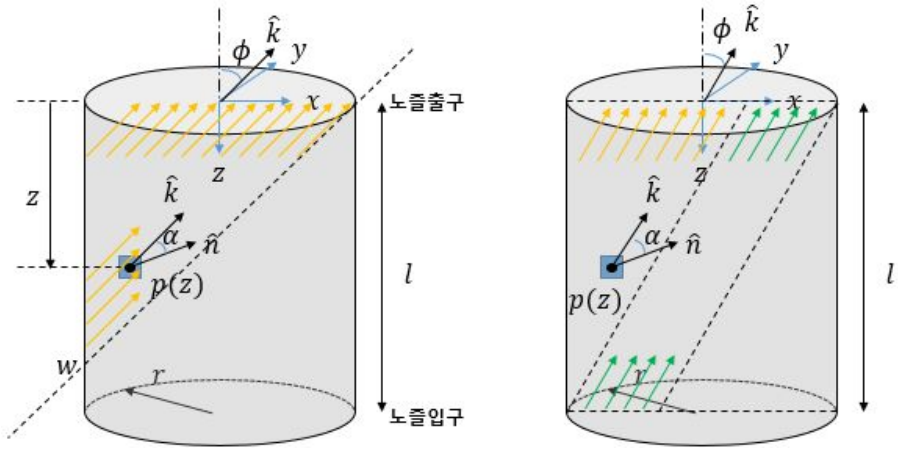
$$u(\phi) = -4r^2 \cos\phi \left[\int_{\theta_0}^{\theta_w} a \frac{2r \cos\theta_z}{\tan\phi} \sin\theta_z^2 d\theta_z + \int_{\theta_0}^{\theta_w} b \sin\theta_z^2 d\theta_z \right] \quad (3.15)$$

θ_w 는 $z=w$ 일 때 해당하는 θ_z 값으로 식 (3.7)에 의해서 $\theta_w = 0^\circ$, θ_0 은 $z=0$ 일 때 해당하는 θ_z 값으로 원통형 노즐의 경우 항상 $\theta_0 = \pi/2$ 가 된다. 해당 값을 대입해서 계산하면 다음과 같이 나타낼 수 있다.

CASE I. $\tan\phi > 2r/l$:

$$u(\phi) = 4r^2 \cos\phi \left(a \frac{2r}{\tan\phi} \frac{1}{3} + b \frac{\pi}{4} \right) \quad (3.16)$$

3.1.4 노즐 벽면에 충돌 후 노즐 출구로 방출되는 분자, $\tan\phi < 2r/l$



(a) CASE. I $\tan\phi > 2r/l$

(b) CASE. II $\tan\phi < 2r/l$

그림 3-8 노즐의 방출각(ϕ)에 따른 물질 방출 위치 변화

3.1.3 에서 구한 $\tan\phi > 2r/l$ 인 경우에는 노즐 벽면에서 방출된 분자만 k 방향으로 방출될 수 있기 때문에 노즐 입구에 대해서 고려할 필요가 없었다. 하지만 $\tan\phi < 2r/l$ 인 경우에는 노즐 입구에서 직접 노즐 출구로 방출되는 분자가 있고, 노즐 벽면에서 충돌 후 방출되는 분자도 있기 때문에 각각에 대한 계산이 필요하다.

먼저 노즐 벽면에서 방출되는 분자의 수를 구하기 위해서 식 (3.9)를 다시 써보면 다음과 같다.

$$u_1(\phi) = \int_0^L \int_{-\theta_z}^{\theta_z} p(z) \cos\theta \sin\phi r d\theta dz \quad (3.17)$$

z 방향 적분 구간 L 은 노즐의 길이에 해당한다.

$U_1(\phi)$ 는 $\tan\phi < 2r/l$ 경우 방출되는 분자 중 노즐의 벽면에서 충돌 후 방출되는 분자를 의미한다.

3.1.3 에서 과정과 동일하게 전개해보면 식 (3.15)와 유사하게 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$u_1(\phi) = -4r^2 \cos\phi \left[\int_{\theta_0}^{\theta_L} a \frac{2r \cos\theta_z}{\tan\phi} \sin^2\theta_z d\theta_z + \int_{\theta_0}^{\theta_L} b \sin^2\theta_z d\theta_z \right] \quad (3.18)$$

이때 θ_L 은 $z=L$ 인 위치에서 노즐의 원통과 가상의 원통이 만나는 교점이 되는 각도로 그림 3-9 의 노즐 입구에서 두원의 교점이 만드는 각도가 된다. 식 (3.7)을 이용하면 다음과 같이 θ_L 을 구할 수 있다.

$$\theta_L = \cos^{-1} \left(\frac{l \tan\phi}{2r} \right) \quad (3.19)$$

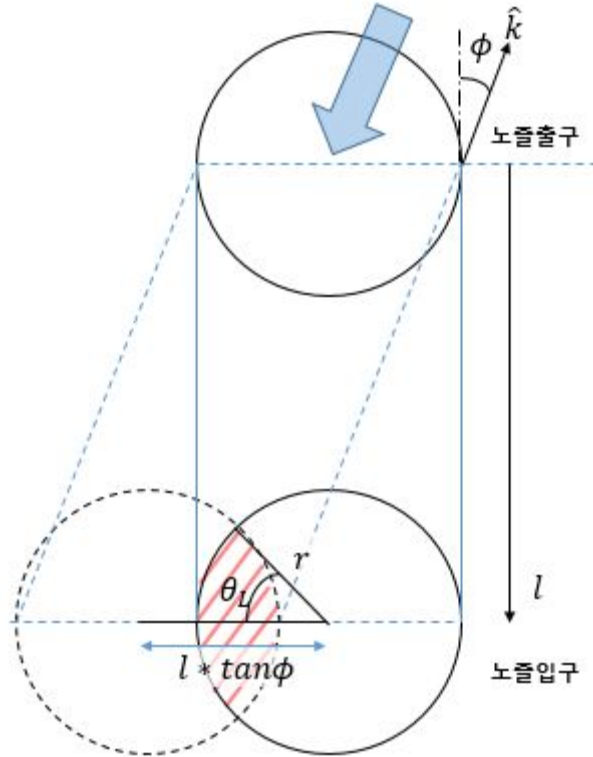


그림 3-9 $z=1$ 위치에서 원호의 경계값

식 (3.19)를 이용하여 식 (3.18)을 계속 적분해보면 다음과 같이 정리할 수 있다.

CASE II. $\tan \phi < 2r/l$, 노즐 벽면 :

$$\begin{aligned}
 u_1(\phi) &= -4r^2 \cos \phi \left[a \frac{2r}{\tan \phi} \left(\frac{\sin^3 \theta_L - 1}{3} \right) + b \left(\frac{1}{2} \theta_L - \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. \frac{1}{2} \sin \theta_L \cos \theta_L - \frac{\pi}{4} \right) \right] \quad (3.20)
 \end{aligned}$$

이때 θ_L 은 식 (3.19)와 같다.

3.1.5 노즐 입구에서 노즐 출구로 방출되는 분자, $\tan\phi < 2r/l$

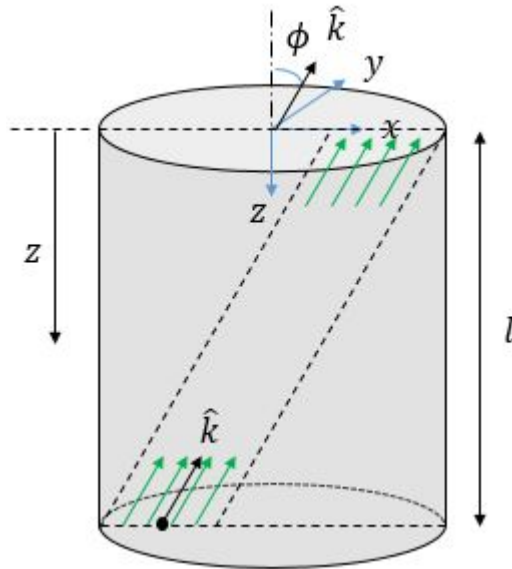


그림 3-10 노즐 입구에서 출구로 방출되는 분자

노즐 입구에서 노즐 출구로 직접 방출되는 분자는 그림 3-10 과 같다. $\tan\phi < 2r/l$ 인 경우 노즐 입구에서 노즐 출구로 직접 분자가 방출될 수 있는데, 이때 $-k$ 방향으로 노즐 출구를 통해서 보이는 노즐 입구 면적에서만 k 방향으로 분자를 방출할 수 있다. 이 면적은 그림 3-9 에서 노즐의 원통과 가상의 원통이 겹치는 부분의 넓이가 된다. 이 넓이는 중심각도가 θ_L 인 부채꼴의 넓이에서 한쪽 각도가 θ_L 이고 노즐의 반지름을 장변으로 하는 직각삼각형의 넓이를 빼서 구할 수 있다. 이 넓이를 A 라고 하면 A 는 다음과 같이 나타낼 수 있다. θ_L 은 식 (3.19)와 같다.

$$A = \left(r^2 \theta_L - l \frac{\tan\phi}{2} r \sin\theta_L \right) \times 2 \quad (3.21)$$

그림 3-3 의 k 방향으로 나가는 방향의 분자 수를 구하는 공식을 적용해보면 노즐 입구에서 노즐 출구 방향으로 방출되는 분자의 수는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$u_2(\phi) = c \times \cos\phi \times A \quad (3.22)$$

$U_2(\phi)$ 노즐 입구에서 k 방향으로 노즐 출구로 직접 방출되는 분자의 수를 의미하고, c 는 노즐 입구에서 분자의 밀도이다. 식 (3.21)을 식 (3.22)에 대입하면 다음과 같이 정리할 수 있다.

CASE II. $\tan\phi < 2r/l$, 노즐 입구 :

$$u_2(\phi) = 2c \cos\phi \left(r^2 \theta_L - l \frac{\tan\phi}{2} r \sin\theta_L \right) \quad (3.23)$$

3.1.6 원통형 노즐의 방사특성

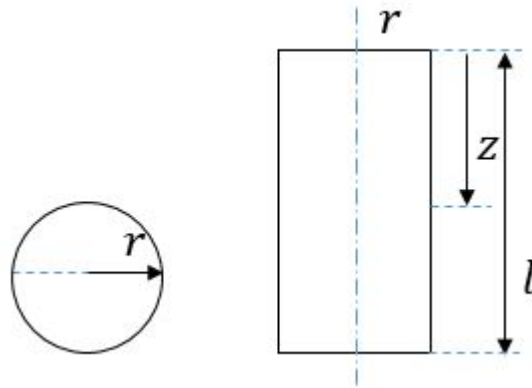


그림 3-11 원통형 노즐 형상

앞에서 구한 원통형 노즐의 방사특성을 정리해보면 다음과 같다.

CASE I. $\tan\phi > 2r/l$:

$$u(\phi) = 4r^2 \cos\phi \left(a \frac{2r}{\tan\phi} \frac{1}{3} + b \frac{\pi}{4} \right) \quad (3.24)$$

CASE II. $\tan\phi < 2r/l$:

$$\begin{aligned} u(\phi) = & \\ & -4r^2 \cos\phi \left[a \frac{2r}{\tan\phi} \left(\frac{\sin^3\theta_L - 1}{3} \right) + b \left(\frac{1}{2}\theta_L \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{1}{2}\sin\theta_L \cos\theta_L - \frac{\pi}{4} \right) \right] \\ & + 2ccos\phi \left(r^2\theta_L - l \frac{\tan\phi}{2} r \sin\theta_L \right) \quad (3.25) \end{aligned}$$

θ_L 은 식 (3.19)와 같다. 위 식을 보면 $\tan\phi = 2r/l$ 인 부분을 경계로 방사특성 계산식이 달라지는데, 이때 경계가 되는 ϕ 값을 임계각(critical angle)이라고 할 수 있다. 기하학적으로 $\tan\phi = 2r/l$ 인 위치는 노즐의 출구를 통해 노즐의 입구가 더 이상 보이지 않게 되는 각도, 즉 노즐 출구의 오른쪽 끝에서 노즐 입구의 왼쪽 끝을 잇는 대각선이 만드는 각도가 된다.

3.2 원통형 노즐의 방사특성 결과

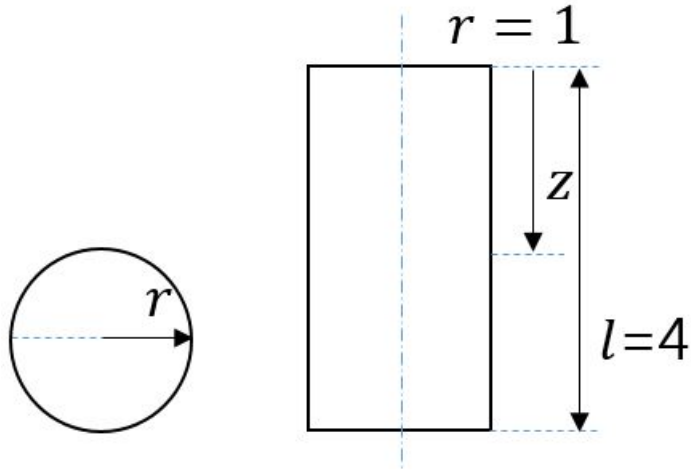


그림 3-12 반지름 $r=1$, 노즐 길이 $l=4$ 인 원통형 노즐

예를 들어 반지름이 1, 노즐의 길이가 4 인 노즐의 방사특성을 앞에서 계산한 식(3.24) 식(3.25)를 이용해서 구하는 과정은 다음과 같다. 노즐 입구 면의 압력에 해당하는 값 c 를 1 이라고 하면 노즐 내부 벽면 압력에 해당하는 식(3.14)에서 a, b 는 Clausing 계산식에 의해서 다음과 같이 계산할 수 있다.^[6]

노즐 입구 벽면 압력 ($z=1$) :

$$\xi_0 = \frac{1+\gamma^2-(1+\gamma^2)^{1/2}}{\gamma(1+\gamma^2)^{1/2}+\gamma^2} \quad (3.26)$$

노즐 출구 벽면 압력 ($z=0$) :

$$\xi_1 = 1 - \xi_0 \quad (3.27)$$

이때 $\gamma = 2r/l$ 로 지름과 노즐 길이 비율이다.

식 (3.26) 식 (3.27)을 이용하여 계산하면 반지름이 1, 노즐 길이가 4 인 노즐의 경우 a, b 는 각각 0.1684, 0.1631 이다. 이때 $\tan\phi = 2r/l$ 에 해당하는 $\phi_{\text{critical angle}}$ 은 26.6° 이다. 이를 그래프로 그려보면 그림 3-13 과 같다.

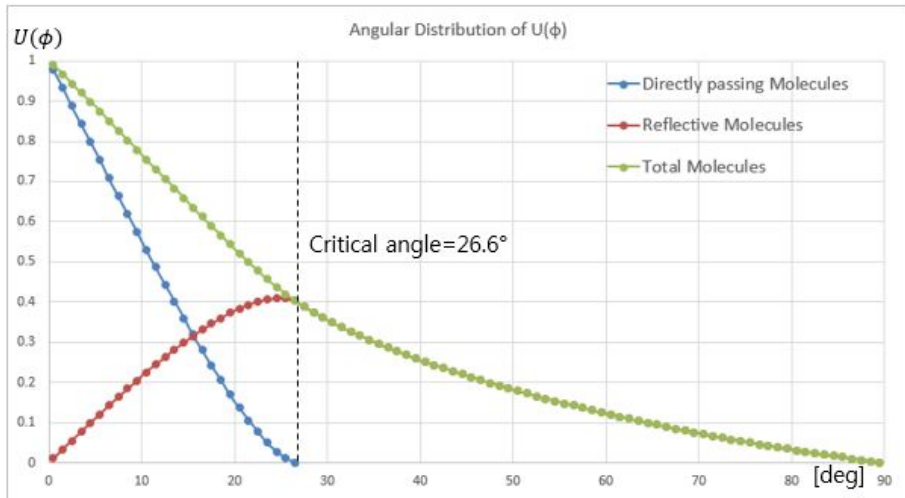


그림 3-13 노즐(r=1, l=4)의 방사특성 결과

그림 3-13 에서 Directly passing Molecules 로 나타낸 부분은 노즐 입구에서 노즐 출구로 직접 방출되는 분자를 의미한다. 앞에서 설명한것처럼 노즐 입구에서 노즐 출구로 직접 통과하는 분자는 임계각(Critical Angle)까지만 존재할 수 있기때문에, 위 그래프에서도 임계각에 해당하는 26.6° 이상에서는 값이 0 이 되는 것을 확인할 수 있다. 또 이 부분은 식(3.25)에서 노즐 입구면의 압력값 'c' 를 포함하는 부분 즉 식(3.23)에 해당하는 부분이다.

그림 3-13 에서 Reflective Molecules 로 나타낸 부분은 노즐 벽면에서 방출되는 분자로 식 (3.25)에서 노즐 입구에서의 방출에 해당하는 식(3.23)부분을 제외한 부분에 만드는 값이다. 방출각도 φ가

커짐에 따라 점점 증가하다가 감소하는 경향을 보인다. 임계각보다 큰 부분에서는 식(3.24)로 나타낼 수 있다.

다음 표 3-1 은 서로 다른 노즐 길이에 해당하는 노즐 내부 압력 함수 식(3.14)의 상수값 계산결과이다. 노즐 길이가 각각 2, 3, 4, 6 일 때 Clausing 계산식(3.26)에 의한 a, b 값을 나타내었다. 실제 a, b 값은 c 값에 대해 상대적인 값이지만 여기서는 계산상의 편의를 위해 c 를 1 로 나타내었다.

R	1	1	1	1
L	2	3	4	6
Φ_{critical}	45°	33.7°	26.6°	18.4°
ξ_0	0.2426	0.1947	0.1631	0.1233
ξ_1	0.7574	0.8053	0.8369	0.8767
a	0.2574	0.2035	0.1684	0.1256
b	0.2426	0.1947	0.1631	0.1233
c	1	1	1	1

표 3-1 노즐 길이에 따른 파라미터

표 3-1 과 식 (3.24), 식 (3.25)를 이용하면 반지름 1, 노즐 길이 2, 3, 4, 6 에 해당하는 원통형 노즐의 방사특성을 알 수 있다.

3.3 몬테카를로 시뮬레이션 결과

3.3.1 몬테카를로 시뮬레이션

앞에서 구한 노즐의 방사특성 계산식의 유효성을 검증하기 위하여 몬테카를로 시뮬레이션을 수행하였다.

```
/*-----*
|=====|   F i e l d   |   OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
| \ \ \ \ |   O p e r a t i o n |   Version:  2.3.1
|  \ \ \  |   A n d           |   Web:      www.OpenFOAM.org
| \ \ \ \ |   M a n i p u l a t i o n |
|-----*
Build  : 2.3.1-bcfaaa7b8660
Exec   : ./dsmcFoam
Date   : Apr 19 2016
Time   : 14:01:13
Host   : "snu-i7"
PID    : 4298
Case   : /home/simulation/simulation/ms/conical_nozzle/r1h6r2
nProcs : 1
sigFpe : Enabling floating point exception trapping (FOAM_SIGFPE).
fileModificationChecking : Monitoring run-time modified files using timeStampMaster
allowSystemOperations : Allowing user-supplied system call operations

// ***** //
```

그림 3-14 OpenFOAM 기반의 DSMC Solver

몬테카를로 시뮬레이션은 OpenFOAM 기반의 DSMC Solver 를 사용하였고 표 3-2 와 같은 조건하에서 수행하였다.

Item	Value
Equivalent Particles	1E+11
Wall Interaction Model	Maxwellian Thermal
Binary Collision Model	Variable Hard Sphere
Inlet Density	1E+20
Molecule Mass	1.791E-22
Molecule Diameter	5.5E-21
inlet Temp.(K)	1373
Nozzle Temp.(K)	1573
Chamber Temp.(K)	273
CPU	Intel i7-4700k
Memory	8GB

표 3-2. 시뮬레이션 조건

동일한 노즐 형상에 대해 시뮬레이션 시간을 증가시켜가면서 시뮬레이션을 수행하였고, 그 조건들은 다음과 같다.

	R1L2	R1L2	R1L2	R1L2
Time Step(sec)	0.001	0.001	0.001	0.001
Iteration #	10000	40000	160000	640000
simulation time(sec)	10	40	160	640
inlet mesh #	144	144	144	144
nozzle bound mesh #	192	192	192	192
chamber mesh #	5812	5812	5812	5812
Execution Time(sec)	2748	11978	48045	194350
Execution Time(hr)	0.76	3.33	13.35	53.99
Outlet Particle #	2.08E+06	8.31E+06	3.32E+07	1.33E+08

표 3-3 원통형 노즐($r=1, l=2$) 시뮬레이션 조건

표 3-3 은 노즐 반지름이 1, 길이가 2 인 노즐에 대한 시뮬레이션 시간에 따른 표이다. 동일한 노즐에 대해서 반복 계산(Iteration)를 각각 10000 회, 40000 회, 160000 회, 640000 회 수행하였고, 그에 따른 총 계산 시간은 0.76 시간, 3.33 시간, 13.35 시간, 53.99 시간이 소요되었다. 계산 횟수가 증가함에 따라 노즐 출구를 통과한 입자수는 $2.08E+06$ 개에서 $1.33E+08$ 개로 시뮬레이션 시간에 거의 비례하게 증가하였다.

동일한 방법으로 노즐 방법으로 길이가 3, 4, 6 인 노즐에 대해서도 시뮬레이션을 수행하였다. 다음의 표 3-4, 표 3-4, 표 3-5 은 각각의 노즐에 대한 시뮬레이션 시간에 따른 차이를 나타낸 표이다.

Item	R1L3	R1L3	R1L3	R1L3
Time Step(sec)	0.001	0.001	0.001	0.001
Iteration #	10000	40000	160000	640000
simulation time(sec)	10	40	160	640
inlet mesh #	144	144	144	144
nozzle bound mesh #	240	240	240	240
chamber mesh #	5812	5812	5812	5812
Execution Time(sec)	2912	12743	51182	207092
Execution Time(hr)	0.81	3.54	14.22	57.53
Outlet Particle #	1.69E+06	6.78E+06	2.71E+07	1.09E+08

표 3-4 원통형 노즐(r=1, l=3) 시뮬레이션 조건

Item	R1H4	R1H4	R1H4	R1H4
Time Step(sec)	0.001	0.001	0.001	0.001
Iteration #	10000	40000	160000	640000
simulation time(sec)	10	40	40	640
inlet mesh #	144	144	144	144
nozzle bound mesh #	288	288	288	288
chamber mesh #	5812	5812	5812	5812
Execution Time(sec)	3130	13657	55132	222330
Execution Time(hr)	0.87	3.79	15.31	61.76
Outlet Particle #	1.44E+06	4.45E+06	2.30E+07	9.21E+07

표 3-5 원통형 노즐(r=1, l=4) 시뮬레이션 조건

Item	R1H6	R1H6	R1H6	R1H6
Time Step(sec)	0.001	0.001	0.001	0.001
Iteration #	10000	40000	160000	640000
simulation time(sec)	10	40	160	640
inlet mesh #	144	144	144	144
nozzle bound mesh #	576	576	576	576
chamber mesh #	5812	5812	5812	5812
Execution Time(sec)	3307	14177	48961	200357
Execution Time(hr)	0.92	3.94	13.60	55.65
Outlet Particle #	1.11E+06	4.45E+06	1.78E+07	7.11E+07

표 3-6 원통형 노즐(r=1, l=6) 시뮬레이션 조건

3.3.2 원통형 노즐($r=1, l=2$)의 방사특성

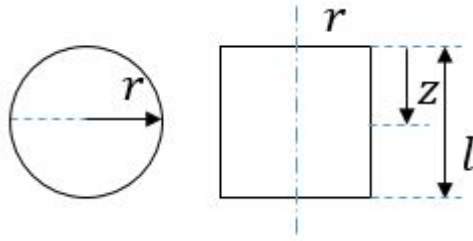


그림 3-15 원통형 노즐($r=1, l=2$)

다음은 표 3-3 의 반지름 1, 노즐 길이 2 인 노즐에 대한 몬테카를로 시뮬레이션 결과이다. 시뮬레이션 시간(Simulation time)은 time step x iteration 횟수에 해당하는 값이다. 실시간으로 해당 노즐에서 분자의 거동을 추적한 시간이라고 할 수 있다.

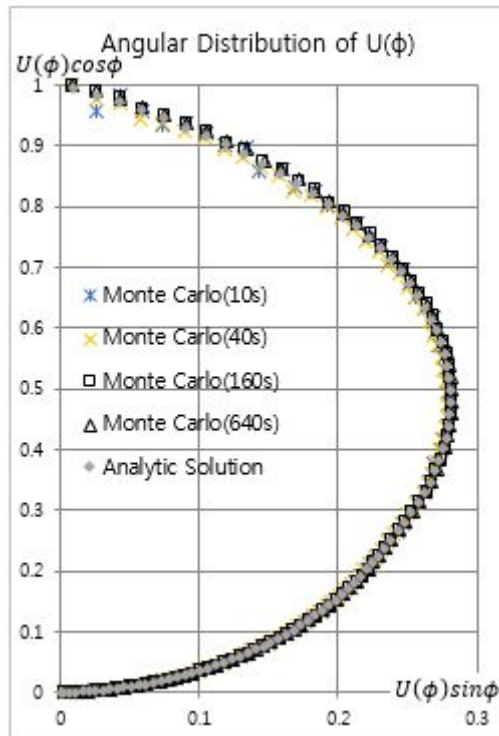


그림 3-16 원통형 노즐($r=1, l=2$)의 방사특성

몬테카를로 시뮬레이션에서 시뮬레이션 시간이 증가함에 따라 앞에서 구한 노즐의 방사특성에 대한 해석적 해(Analytic Solution)에 점점 수렴해가는 것을 볼 수 있다. 다음은 몬테카를로 시뮬레이션의 방사특성과 해석적 해의 방사특성의 차이 값을 나타낸 그래프이다.

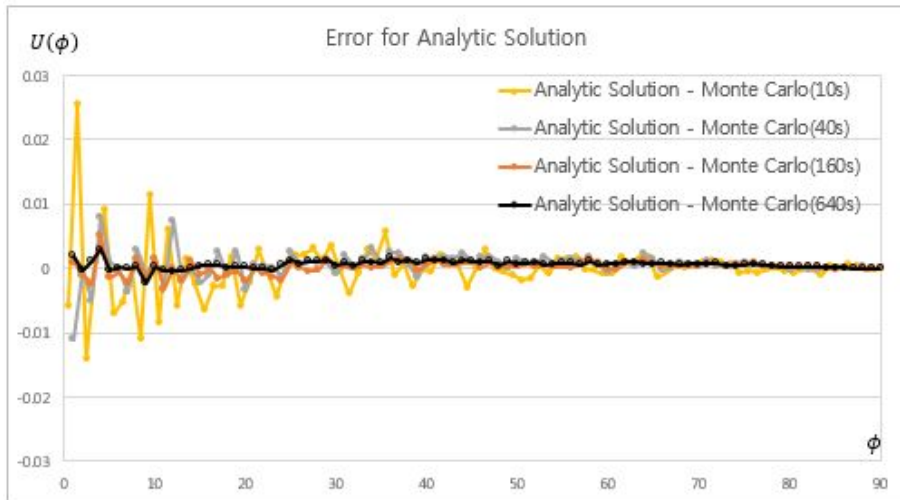


그림 3-17 몬테카를로 시뮬레이션과 해석적 해의 차이값

시뮬레이션 시간이 증가할 수록 두 방사특성이 차이가 작아지고, 방출각도(ϕ)가 커질수록 차이 값이 점점 작아지는 것을 확인할 수 있다. 작은 각도에서 차이가 큰 이유는 각도가 작은 영역에서는 면적각이 작아서 실제 해당 영역으로 들어가는 분자수가 적기 때문이다.

simulation time		10s	40s	160s	640s
R1L2	RMSE	4.40E-03	2.19E-03	1.07E-03	8.44E-04
	Particle#	2.08E+06	8.31E+06	3.32E+07	1.33E+08

표 3-7 원통형 노즐($r=1, l=2$)의 해석적 해에 대한 RMSE

표 3-7 은 원통형 노즐의 방사특성에 대한 해석적 해와 몬테카를로 시뮬레이션으로 구한 노즐의 방사특성값이 차이에 대한 RMSE 값을 나타낸 표이다. 그림 3-17 과 마찬가지로 시뮬레이션 시간이 증가하면서 RMSE 가 감소하는 것을 확인할 수 있다.

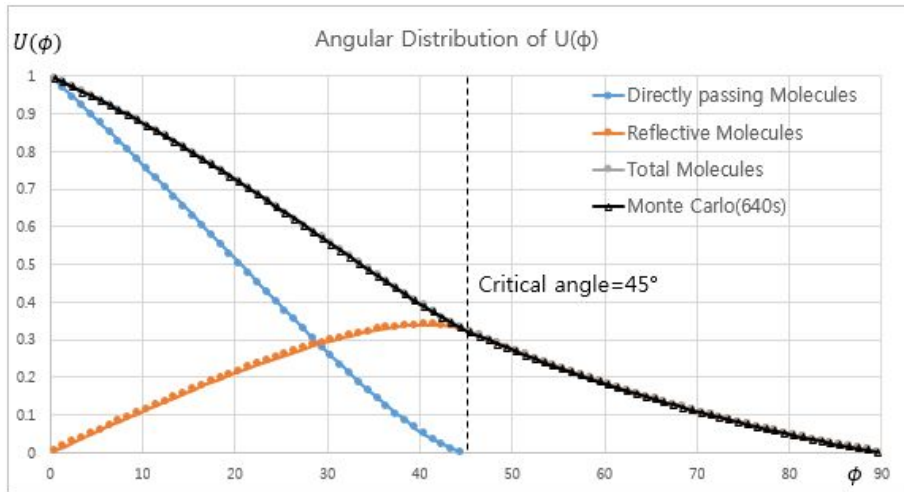


그림 3-18 원통형 노즐($r=1, l=2$)의 방사특성

그림 3-18 은 노즐의 방사특성을 X 축을 ϕ 로 나타낸 그래프이다. 그래프에서 Total Molecules 로 표시된 부분의 본 논문에서 구한 노즐의 방사특성에 해당하는 해석적 해를 나타낸 선이고, 검은색으로 표시한 부분은 몬테카를로 시뮬레이션(640s)의 방사특성 결과를 나타낸 선이다. 두 선이 거의 일치하는 것을 확인할 수 있다. 이 두 그래프의 차이값은 시뮬레이션 시간 640s 기준으로 전체 구간에서 RMSE 가 $8.44E-04$ 이다. 이 값은 전체구간 평균 방사특성값 0.407139 의 0.21%에 해당한다.

φ[deg]	Analytic Solution			Monte Carlo Simulation			
	Directly passing Molecules	Reflective Molecules	Total Molecules	Monte Carlo(640s)	Monte Carlo(160s)	Monte Carlo(40s)	Monte Carlo(10s)
0.5	0.9888513	0.005555398	0.994406697	0.99240649	0.99340649	1.00540649	1.00040649
1.5	0.96633181	0.016662371	0.982994181	0.983289312	0.984009112	0.983461519	0.957396755
2.5	0.943528139	0.027757874	0.971286013	0.970124515	0.973702894	0.976288213	0.985415873
3.5	0.920454065	0.03883423	0.959288295	0.956296083	0.954271818	0.951269935	0.958348064
4.5	0.89712352	0.049883724	0.947007244	0.947257581	0.948412029	0.946070396	0.937827685
5.5	0.873550617	0.060898583	0.9344492	0.934333028	0.935076067	0.934571915	0.9415049
6.5	0.849749678	0.07187096	0.921620637	0.921588773	0.92386229	0.925310988	0.92692895
7.5	0.825735261	0.082792911	0.908528172	0.908266288	0.907077734	0.905571915	0.908749128
8.5	0.801522219	0.093656382	0.895178573	0.897422134	0.896808691	0.896183379	0.9062105
9.5	0.777125588	0.104453185	0.881578773	0.881392041	0.88011637	0.880229054	0.870090249
10.5	0.752560907	0.115174975	0.867735882	0.868056335	0.870949771	0.870756702	0.876203157
11.5	0.72784397	0.125813226	0.853657196	0.854065666	0.853731202	0.846143971	0.8476159
12.5	0.702991007	0.136359209	0.839350215	0.839600383	0.841307963	0.84114979	0.845132146
13.5	0.678018701	0.146803956	0.824822656	0.82480014	0.823721452	0.824950755	0.823335148
14.5	0.652944236	0.157138233	0.810082469	0.809707302	0.811121241	0.812320238	0.81260727
15.5	0.627785351	0.167382506	0.795137857	0.794546454	0.795110137	0.796093246	0.801608733
16.5	0.602560402	0.177436896	0.779997297	0.779487472	0.781641295	0.777490859	0.782796111
17.5	0.577288423	0.187381139	0.764669561	0.764598731	0.765510137	0.765792228	0.767411828
18.5	0.55198921	0.197174534	0.749163744	0.748977626	0.749592463	0.746486876	0.747353383
19.5	0.526683402	0.206805889	0.733489291	0.733229032	0.735518065	0.736858817	0.739282103
20.5	0.50139258	0.216263453	0.717656033	0.717744343	0.717637711	0.717081532	0.719800263
21.5	0.476193979	0.225534844	0.701674223	0.701769053	0.702360615	0.701257668	0.698915542
22.5	0.450947616	0.234606965	0.685554581	0.685861741	0.686783989	0.685394514	0.6861127586
23.5	0.425842441	0.243465903	0.669308343	0.668721056	0.671234051	0.670539573	0.673702217
24.5	0.400850506	0.252096814	0.65294732	0.651644634	0.652113488	0.650474769	0.652352325
25.5	0.376000169	0.260483795	0.636483964	0.635780163	0.636388278	0.635765635	0.634483583
26.5	0.351321733	0.268609716	0.61993145	0.618784185	0.620413869	0.618869805	0.617872088
27.5	0.326847726	0.276456039	0.603303765	0.602190047	0.603595929	0.602306157	0.600245188
28.5	0.302613236	0.28400259	0.586615826	0.585367849	0.585051679	0.585785299	0.585411567
29.5	0.278656321	0.291227284	0.569883604	0.569431429	0.569447279	0.570746912	0.566428209
30.5	0.255018499	0.298105795	0.553124294	0.552344742	0.552813634	0.551175535	0.553559174
31.5	0.231745359	0.304611144	0.536356503	0.535949536	0.536376419	0.536302287	0.540358526
32.5	0.208887313	0.310713183	0.519600496	0.518445799	0.519059394	0.51826352	0.52032139
33.5	0.18650056	0.316377939	0.502878499	0.501957191	0.50277254	0.499730409	0.500118433
34.5	0.164648312	0.321566774	0.486215086	0.485327555	0.485917094	0.485723602	0.484548141
35.5	0.143402412	0.326235262	0.469637674	0.467906568	0.468563396	0.467152865	0.464001877
36.5	0.12284551	0.330331687	0.453177197	0.452192014	0.451842042	0.450849314	0.454395473
37.5	0.103074064	0.333794937	0.436869	0.435652664	0.435691708	0.436315454	0.436109734
38.5	0.084202653	0.336551476	0.420754129	0.419964596	0.421086588	0.422168482	0.423601578
39.5	0.066370459	0.33851075	0.404881209	0.403474522	0.404332178	0.403194116	0.405050664
40.5	0.049751582	0.339557824	0.389309406	0.38807501	0.387886181	0.387727425	0.389870739
41.5	0.034572888	0.33954053	0.374113418	0.372893704	0.37351568	0.372242604	0.37207328
42.5	0.021148686	0.338244289	0.359392975	0.358620961	0.358797981	0.35789007	0.358689663
43.5	0.009962102	0.335332464	0.345294566	0.344090157	0.344437097	0.342962068	0.344769112
44.5	0.001943649	0.330139963	0.332083612	0.330970467	0.331120405	0.331290063	0.33503927
45.5	0	0.320535837	0.320535837	0.319615144	0.320401427	0.318853826	0.320574764
46.5	0	0.309721898	0.309721898	0.308642405	0.308861737	0.307874594	0.306899608
47.5	0	0.299162432	0.299162432	0.298768311	0.299092724	0.298221851	0.299162723
48.5	0	0.288844026	0.288844026	0.287713359	0.288441009	0.288874998	0.289380494
49.5	0	0.27875452	0.27875452	0.278114476	0.27852796	0.277286951	0.279739939
50.5	0	0.268882881	0.268882881	0.26804191	0.268233871	0.267994706	0.270760924
51.5	0	0.259219097	0.259219097	0.258324285	0.258905309	0.258582839	0.26073037
52.5	0	0.249754079	0.249754079	0.249179244	0.249153079	0.247951134	0.249209933
53.5	0	0.240479573	0.240479573	0.239753251	0.240252351	0.239789197	0.241291966
54.5	0	0.231388087	0.231388087	0.230585374	0.23110757	0.23017443	0.230029913
55.5	0	0.222472821	0.222472821	0.221676102	0.222294354	0.221105988	0.221060712
56.5	0	0.213727607	0.213727607	0.213143017	0.212971468	0.212465595	0.212047271
57.5	0	0.205146853	0.205146853	0.204060601	0.203784325	0.203442152	0.205340154

58.5	0	0.196725497	0.196725497	0.196144268	0.195918968	0.196144339	0.197102657
59.5	0	0.188458959	0.188458959	0.187831576	0.18842266	0.189041628	0.189354293
60.5	0	0.180343104	0.180343104	0.179639171	0.180453403	0.179953922	0.181184664
61.5	0	0.172374205	0.172374205	0.171368982	0.171485606	0.171432638	0.170612741
62.5	0	0.164548915	0.164548915	0.163599047	0.163619841	0.164308616	0.163931606
63.5	0	0.156864229	0.156864229	0.156130987	0.155649975	0.154660336	0.155429632
64.5	0	0.149317466	0.149317466	0.148645186	0.148613469	0.147990812	0.147545945
65.5	0	0.141906242	0.141906242	0.141032332	0.141460931	0.142250448	0.143300194
66.5	0	0.134628446	0.134628446	0.134016778	0.134198722	0.134566539	0.135225341
67.5	0	0.127482224	0.127482224	0.12694616	0.12706155	0.12651021	0.127236198
68.5	0	0.120465958	0.120465958	0.119733501	0.120001444	0.120093829	0.120323277
69.5	0	0.11357825	0.11357825	0.112954903	0.113177694	0.113306235	0.113359316
70.5	0	0.106817911	0.106817911	0.106182385	0.106146162	0.105553568	0.106038085
71.5	0	0.100183941	0.100183941	0.099342912	0.09949254	0.099813573	0.099048475
72.5	0	0.09367552	0.09367552	0.093293524	0.093390119	0.093212651	0.092914243
73.5	0	0.087291999	0.087291999	0.086877553	0.086689905	0.086553445	0.086779082
74.5	0	0.081032884	0.081032884	0.08056483	0.080356713	0.080056953	0.081793971
75.5	0	0.074897831	0.074897831	0.074243721	0.074081894	0.074230639	0.075356813
76.5	0	0.068886637	0.068886637	0.068401379	0.068472547	0.068440971	0.069620807
77.5	0	0.062999229	0.062999229	0.062662223	0.062793693	0.062635163	0.063161371
78.5	0	0.057235661	0.057235661	0.056960012	0.056851585	0.056925643	0.0572417
79.5	0	0.051596105	0.051596105	0.051311284	0.051338853	0.051776144	0.052074279
80.5	0	0.046080846	0.046080846	0.045842956	0.045963094	0.046000682	0.046848053
81.5	0	0.040690278	0.040690278	0.040505126	0.040494589	0.04082057	0.040805326
82.5	0	0.035424897	0.035424897	0.035231496	0.03516832	0.035649463	0.035737096
83.5	0	0.030285297	0.030285297	0.030134796	0.030295576	0.030112005	0.031253023
84.5	0	0.025272168	0.025272168	0.025171796	0.025304008	0.025414905	0.024906681
85.5	0	0.020386293	0.020386293	0.02026908	0.020360005	0.020435862	0.02029791
86.5	0	0.015628543	0.015628543	0.015623406	0.015538332	0.015448318	0.01515331
87.5	0	0.010999877	0.010999877	0.010962149	0.010864315	0.010733055	0.010748942
88.5	0	0.006501337	0.006501337	0.006519602	0.006480035	0.006495767	0.006780559
89.5	0	0.002134049	0.002134049	0.002135346	0.002168661	0.002174038	0.002321013

표 3-8 원통형 노즐 ($r=1, l=2$)의 방사특성 데이터

3.3.3 원통형 노즐($r=1, l=3$)의 방사특성

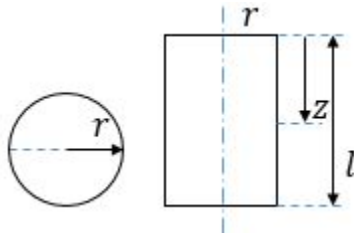


그림 3-19 원통형 노즐($r=1, l=3$)

다음은 원통형 노즐($r=1, l=3$)에 대한 몬테카를로 시뮬레이션 결과이다.

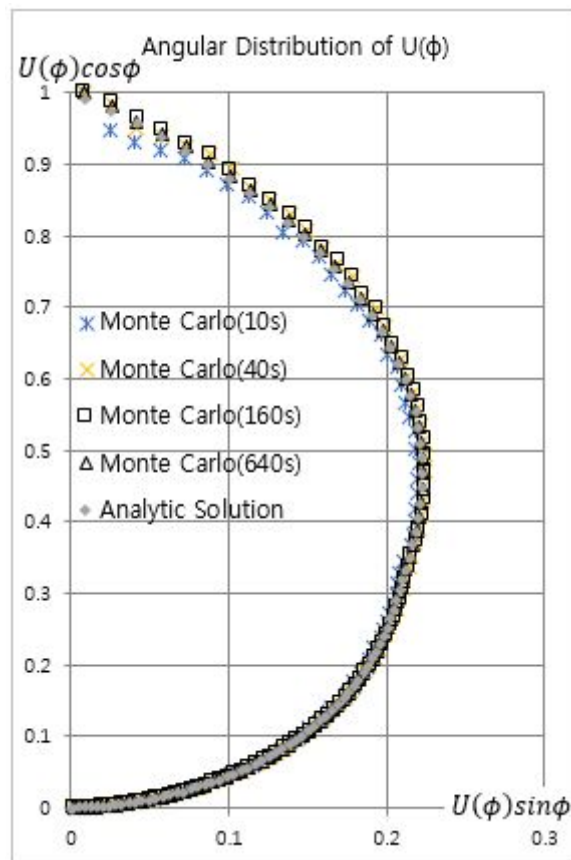


그림 3-20 원통형 노즐($r=1, l=3$)의 방사특성

몬테카를로 시뮬레이션에서 시뮬레이션 시간이 증가함에 따라 앞에서 계산한 해석적 해에 점점 수렴해가는 것을 볼 수 있다.

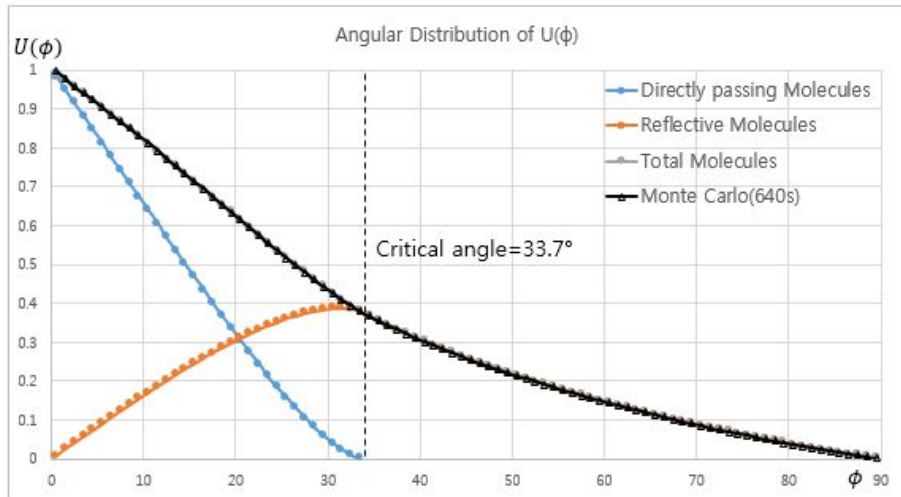


그림 3-21 원통형 노즐($r=1, l=3$)의 방사특성

그림 3-21 은 본 논문에서 구한 노즐의 방사특성에 대한 해석적 해와 몬테카를로 시뮬레이션으로 구한 노즐의 방사특성의 값을 같이 나타낸 그래프이다. 두 그래프가 거의 일치하는 것을 확인할 수 있다.

simulation time		10s	40s	160s	640s
R1L3	RMSE	3.63E-03	2.36E-03	1.15E-03	1.07E-03
	Particle#	1.69E+06	6.78E+06	2.71E+07	1.09E+08

표 3-9 원통형 노즐($r=1, l=3$)의 해석적 해에 대한 RMSE

이 두 그래프의 차이값은 시뮬레이션 시간 640s 기준으로 전체 구간에서 RMSE 가 $1.07E-03$ 이다. 이 값은 평균 방사특성값 0.351726 의 0.31%에 해당한다.

ϕ [deg]	Analytic Solution			Monte Carlo Simulation			
	Directly passing Molecules	Reflective Molecules	Total Molecules	Monte Carlo(640s)	Monte Carlo(160s)	Monte Carlo(40s)	Monte Carlo(10s)
0.5	0.983296149	0.008332919	0.991629067	0.996628861	0.989128861	0.990628861	1.011628861
1.5	0.949676092	0.024988758	0.97466485	0.979193037	0.977216157	0.974884285	0.960098765
2.5	0.915801109	0.041614563	0.957415672	0.955992628	0.955254445	0.941963231	0.942952497
3.5	0.881704628	0.058190183	0.939894811	0.939561796	0.940240424	0.933046109	0.931377674
4.5	0.847420458	0.074695271	0.922115729	0.923813683	0.922014139	0.920492905	0.920902057
5.5	0.812982913	0.0911092	0.904092113	0.903511044	0.908723689	0.908362176	0.905924037
6.5	0.778426936	0.107410979	0.885837916	0.885368016	0.887831869	0.892250159	0.886413603
7.5	0.743788239	0.123579159	0.867367398	0.867154876	0.866204606	0.86632779	0.873138706
8.5	0.709103444	0.139591732	0.848695176	0.850603066	0.850368996	0.850988794	0.851271183
9.5	0.674410251	0.155426022	0.829836273	0.830768261	0.831181866	0.83335527	0.825546505
10.5	0.63974761	0.171058562	0.810806172	0.813111167	0.814059792	0.813991458	0.815097458
11.5	0.605155919	0.186446496	0.791620879	0.791455689	0.790343149	0.791092762	0.79457829
12.5	0.570677249	0.201619743	0.772296992	0.771843281	0.774067633	0.769970947	0.77170734
13.5	0.536355596	0.216496184	0.75285178	0.753386108	0.756960937	0.756604508	0.752667197
14.5	0.502237177	0.231066094	0.733303271	0.733196061	0.732917935	0.731698104	0.734063672
15.5	0.468370762	0.245299591	0.713670354	0.713584828	0.717478613	0.717324614	0.714055873
16.5	0.434808082	0.259164817	0.693972899	0.69357672	0.694331715	0.695023034	0.698801273
17.5	0.401604291	0.272627608	0.674231899	0.673130253	0.67291645	0.670151359	0.672529081
18.5	0.368818537	0.285651097	0.654469634	0.653920501	0.655574835	0.654881015	0.658354242
19.5	0.33651465	0.298195222	0.634709871	0.633925786	0.633835231	0.633641402	0.635908824
20.5	0.304761975	0.310216132	0.614978107	0.614400178	0.614613433	0.614140924	0.612120874
21.5	0.273636432	0.321665434	0.595301866	0.594538428	0.595134732	0.59331837	0.593369886
22.5	0.243221842	0.332489231	0.575711072	0.574388779	0.575114818	0.5744454517	0.576885183
23.5	0.213611643	0.342626881	0.556238523	0.554739829	0.555402706	0.555354909	0.553481867
24.5	0.184911162	0.352009343	0.536920505	0.535603235	0.536748072	0.537490453	0.537227642
25.5	0.157240691	0.360556922	0.517797613	0.516150413	0.516715718	0.517173768	0.515439867
26.5	0.13073979	0.368176084	0.498915874	0.497515554	0.49804885	0.496246739	0.49888124
27.5	0.105573557	0.374754793	0.48032835	0.479741064	0.480081554	0.479990924	0.478043552
28.5	0.081942226	0.380155313	0.462097539	0.461205336	0.461829302	0.461472881	0.461188541
29.5	0.060096861	0.384202331	0.444299192	0.443389264	0.443138998	0.444564979	0.444407266
30.5	0.040367466	0.386661507	0.427028973	0.425911089	0.426547828	0.426966974	0.429658824
31.5	0.023220548	0.387195115	0.410415663	0.408626198	0.408856243	0.407631437	0.408030784
32.5	0.00940687	0.385247004	0.394653874	0.393299716	0.394228734	0.394703385	0.392726165
33.5	0.000607298	0.379533154	0.380140453	0.37937274	0.379756585	0.377803171	0.379797807
34.5	0	0.367628287	0.367628287	0.366911343	0.367429009	0.36719117	0.368802
35.5	0	0.355700883	0.355700883	0.354882615	0.355813627	0.355818984	0.3546262
36.5	0	0.344202892	0.344202892	0.343517318	0.343427288	0.343275132	0.343923911
37.5	0	0.333100399	0.333100399	0.332076023	0.332827349	0.332692777	0.332426702
38.5	0	0.322363182	0.322363182	0.321541418	0.321482106	0.320590267	0.321779928
39.5	0	0.311964238	0.311964238	0.310827452	0.310651595	0.309721726	0.311686314
40.5	0	0.301879392	0.301879392	0.300855129	0.300810246	0.299647417	0.298796371
41.5	0	0.292086951	0.292086951	0.291226699	0.292163779	0.291938655	0.296678576
42.5	0	0.282567421	0.282567421	0.281944765	0.282626141	0.2817162	0.283327913
43.5	0	0.273303246	0.273303246	0.272468407	0.272606868	0.271733534	0.275686865
44.5	0	0.264278598	0.264278598	0.263539095	0.263544909	0.264266494	0.264598378
45.5	0	0.255479182	0.255479182	0.254464768	0.254264999	0.253597811	0.254345159
46.5	0	0.246892075	0.246892075	0.246233701	0.246798934	0.245217196	0.249181993
47.5	0	0.238505582	0.238505582	0.23786409	0.238738737	0.238880544	0.239418212
48.5	0	0.230309108	0.230309108	0.229650441	0.230422954	0.230031792	0.234535724
49.5	0	0.222293048	0.222293048	0.221563311	0.2218162	0.220684347	0.219946409
50.5	0	0.214448691	0.214448691	0.213672653	0.214388795	0.213474148	0.213651023
51.5	0	0.206768132	0.206768132	0.205972399	0.205929017	0.205486213	0.205871368
52.5	0	0.199244194	0.199244194	0.198486318	0.198872564	0.199134995	0.199523331
53.5	0	0.191870364	0.191870364	0.191169635	0.191413001	0.189778903	0.189279268
54.5	0	0.184640731	0.184640731	0.183974641	0.184019828	0.183037298	0.182499017
55.5	0	0.177549929	0.177549929	0.1770778	0.177313791	0.176968256	0.1768813
56.5	0	0.170593093	0.170593093	0.169898522	0.170065901	0.169784846	0.168967586
57.5	0	0.163765816	0.163765816	0.162900272	0.163403446	0.16265693	0.163917113

58.5	0	0.157064106	0.157064106	0.156508905	0.156988269	0.156699417	0.158418073
59.5	0	0.150484355	0.150484355	0.149816813	0.150358801	0.149423758	0.147972702
60.5	0	0.144023308	0.144023308	0.143494396	0.14356716	0.143736312	0.144233253
61.5	0	0.137678031	0.137678031	0.137147411	0.13747907	0.136727035	0.137566901
62.5	0	0.131445888	0.131445888	0.130956	0.13148678	0.130949757	0.131420108
63.5	0	0.125324519	0.125324519	0.124742415	0.124814936	0.124878335	0.12601985
64.5	0	0.119311818	0.119311818	0.118839827	0.118930812	0.118862984	0.117251499
65.5	0	0.113405912	0.113405912	0.113020365	0.113018454	0.11326144	0.11312717
66.5	0	0.107605147	0.107605147	0.107167662	0.107324986	0.106991999	0.108016153
67.5	0	0.101908071	0.101908071	0.101558857	0.101768464	0.102428368	0.102452713
68.5	0	0.096313417	0.096313417	0.095657507	0.095979744	0.095966575	0.09739006
69.5	0	0.090820097	0.090820097	0.090324357	0.090477643	0.089733723	0.09032232
70.5	0	0.085427181	0.085427181	0.085022397	0.085261547	0.086032712	0.085554505
71.5	0	0.080133896	0.080133896	0.079664323	0.079980543	0.080192021	0.081216233
72.5	0	0.074939608	0.074939608	0.074499527	0.074794393	0.074532658	0.075893784
73.5	0	0.069843816	0.069843816	0.069370769	0.069355077	0.06901514	0.070660013
74.5	0	0.064846146	0.064846146	0.064537218	0.064661983	0.06469737	0.065479355
75.5	0	0.059946341	0.059946341	0.059753794	0.05985275	0.059699313	0.059721869
76.5	0	0.055144253	0.055144253	0.054834145	0.054694367	0.054075218	0.055087714
77.5	0	0.050439841	0.050439841	0.050216259	0.050362045	0.050582429	0.050749398
78.5	0	0.045833163	0.045833163	0.045620852	0.045856168	0.045972433	0.045189542
79.5	0	0.04132437	0.04132437	0.041142201	0.041142139	0.041192691	0.041317813
80.5	0	0.036913701	0.036913701	0.036666982	0.036791645	0.036641396	0.036156493
81.5	0	0.032601483	0.032601483	0.032434966	0.032355238	0.032430632	0.031539705
82.5	0	0.028388124	0.028388124	0.028271459	0.028274298	0.0283303	0.028628304
83.5	0	0.024274109	0.024274109	0.024112569	0.024167543	0.024323389	0.024256906
84.5	0	0.020259999	0.020259999	0.020150604	0.02014593	0.019996095	0.020096047
85.5	0	0.016346427	0.016346427	0.016263598	0.016217795	0.016071682	0.016654553
86.5	0	0.012534099	0.012534099	0.012456323	0.012346697	0.012507444	0.012685924
87.5	0	0.008823786	0.008823786	0.008794732	0.008789506	0.008757674	0.008651295
88.5	0	0.00521633	0.00521633	0.00523931	0.005320716	0.005333678	0.005600346
89.5	0	0.001712635	0.001712635	0.001701133	0.001721875	0.001792123	0.001806931

표 3-10 원통형 노즐($r=1, l=3$)의 방사특성 데이터

3.3.4 원통형 노즐($r=1, l=4$)의 방사특성

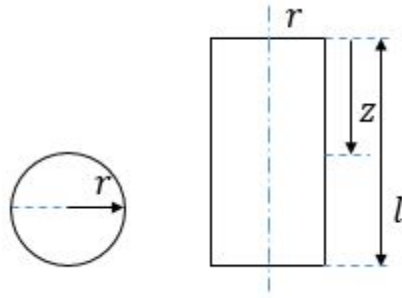


그림 3-22 원통형 노즐($r=1, l=4$)

다음은 원통형 노즐($r=1, l=4$)에 대한 몬테카를로 시뮬레이션 결과이다.

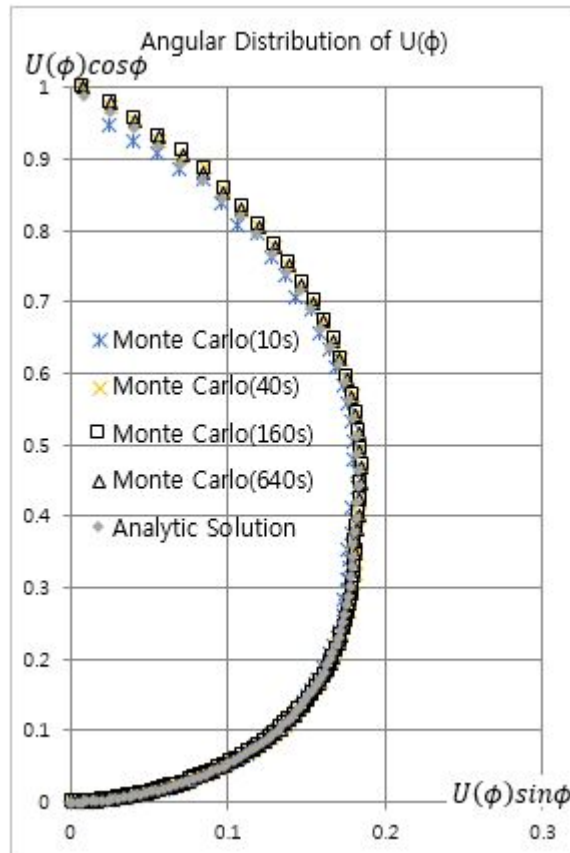


그림 3-23 원통형 노즐($r=1, l=4$)의 방사특성

몬테카를로 시뮬레이션에서 시뮬레이션 시간이 증가함에 따라 앞에서 계산한 해석적 해에 점점 수렴해가는 것을 볼 수 있다.

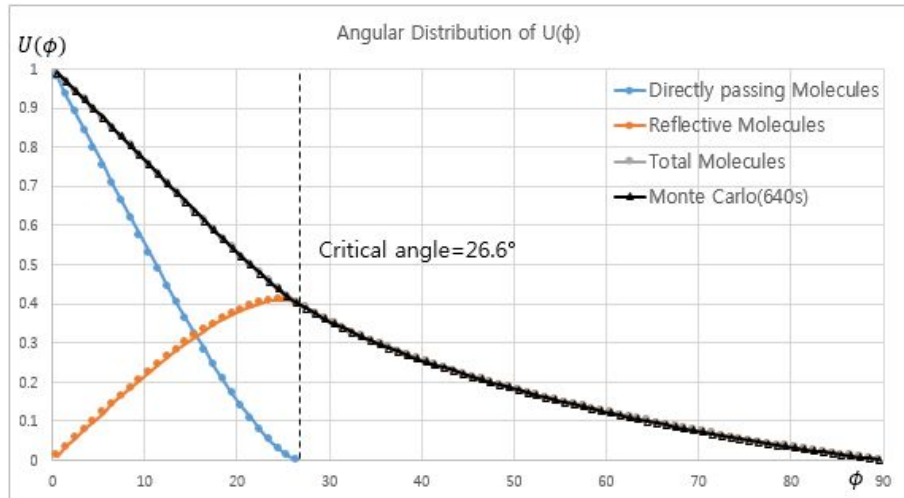


그림 3-24 원통형 노즐($r=1, l=4$)의 방사 특성

그림 3-24 은 본 논문에서 구한 노즐의 방사특성에 대한 해석적 해와 몬테카를로 시뮬레이션으로 구한 노즐의 방사특성의 값을 같이 나타낸 그래프이다. 두 그래프가 거의 일치하는 것을 확인할 수 있다.

simulation time		10s	40s	160s	640s
R1L4	RMSE	3.47E-03	1.66E-03	8.99E-04	5.35E-04
	Particle#	1.33E+06	5.75E+06	2.30+E07	9.21E+07

표 3-11 원통형 노즐($r=1, l=4$)의 해석적 해에 대한 RMSE

이 두 그래프의 차이값은 시뮬레이션 시간 640s 기준으로 전체 구간에서 RMSE 가 $5.35E-04$ 이다. 이 값은 평균 방사특성값 0.311372 의 0.17%에 해당한다.

ϕ [deg]	Analytic Solution			Monte Carlo Simulation			
	Directly passing Molecules	Reflective Molecules	Total Molecules	Monte Carlo(640s)	Monte Carlo(160s)	Monte Carlo(40s)	Monte Carlo(10s)
0.5	0.977741315	0.011110218	0.988851533	0.988851327	0.984851327	0.989851327	1.007851327
1.5	0.933028952	0.033309155	0.966338107	0.96818935	0.96447386	0.962345786	0.955032033
2.5	0.888113871	0.055443465	0.943557337	0.944496362	0.942571957	0.943871157	0.933890191
3.5	0.84306472	0.077469642	0.920534362	0.92169126	0.91831585	0.918529979	0.916998501
4.5	0.797951159	0.09934353	0.897294689	0.897886021	0.90007542	0.895494065	0.89510495
5.5	0.752844261	0.121020049	0.873864309	0.874240359	0.877496266	0.88462004	0.884196627
6.5	0.707816934	0.14245289	0.850269824	0.849854181	0.851091197	0.854129931	0.849284137
7.5	0.662944394	0.163594186	0.82653858	0.827407071	0.827721472	0.826076551	0.821531772
8.5	0.618304685	0.184394138	0.802698823	0.803874706	0.802999764	0.805053683	0.813042554
9.5	0.573979274	0.204800588	0.778779862	0.778364128	0.7785397	0.779019432	0.778572406
10.5	0.530053743	0.224758528	0.754812271	0.755407235	0.754961601	0.755097874	0.754766174
11.5	0.486618594	0.244209515	0.73082811	0.73105039	0.731204791	0.726901536	0.72589654
12.5	0.443770219	0.263090967	0.706861187	0.706305043	0.707953706	0.708680823	0.713412281
13.5	0.401612074	0.281335309	0.682947382	0.683164733	0.682241829	0.682284057	0.681253793
14.5	0.360256133	0.298868899	0.659125032	0.658828928	0.660288787	0.657723351	0.660088907
15.5	0.319824727	0.31561068	0.635435406	0.634823509	0.634965797	0.636150499	0.635807383
16.5	0.280452902	0.331470415	0.611923317	0.6106991	0.609876413	0.611532128	0.613533131
17.5	0.242291546	0.346346353	0.588637899	0.587991193	0.589055303	0.591406145	0.590961282
18.5	0.205511623	0.360122031	0.565633655	0.565199412	0.565034333	0.566562168	0.567323421
19.5	0.170310131	0.372661748	0.542971879	0.542229475	0.541941158	0.54042037	0.541277559
20.5	0.13691881	0.383803884	0.520722694	0.519218371	0.519405075	0.517545581	0.517578705
21.5	0.105617593	0.393350505	0.498968099	0.497981917	0.49881642	0.498552766	0.500706782
22.5	0.076756826	0.401050029	0.477806855	0.476643381	0.476103691	0.47615786	0.48016501
23.5	0.050797652	0.406565398	0.457363049	0.456194725	0.45635102	0.455552986	0.452178202
24.5	0.028396655	0.409406672	0.437803328	0.436795591	0.437077422	0.437669618	0.438989975
25.5	0.010632339	0.408748515	0.419380854	0.418392294	0.418545577	0.418285224	0.418850633
26.5	0.000162248	0.402482585	0.402644833	0.402133854	0.401160032	0.400105926	0.397390454
27.5	0	0.388311026	0.388311026	0.387940585	0.388154805	0.388565288	0.387191914
28.5	0	0.374771093	0.374771093	0.373840006	0.374021814	0.374613486	0.375506179
29.5	0	0.361919664	0.361919664	0.361324329	0.362056428	0.364370887	0.36152855
30.5	0	0.349688237	0.349688237	0.349158191	0.350027575	0.350619588	0.348662392
31.5	0	0.338017171	0.338017171	0.337653592	0.33821086	0.338032012	0.33441012
32.5	0	0.326854322	0.326854322	0.326127505	0.327177743	0.327586751	0.328411068
33.5	0	0.316153926	0.316153926	0.316198038	0.316483889	0.317197398	0.316689678
34.5	0	0.305875676	0.305875676	0.305517266	0.305222551	0.305222965	0.30792231
35.5	0	0.295983951	0.295983951	0.295418199	0.295423647	0.295632392	0.295888236
36.5	0	0.28644718	0.28644718	0.285714378	0.286011517	0.286632679	0.287359601
37.5	0	0.277237298	0.277237298	0.27694139	0.277940602	0.276426855	0.27732569
38.5	0	0.268329295	0.268329295	0.267970249	0.268652725	0.26745045	0.267352837
39.5	0	0.259700827	0.259700827	0.259633204	0.259294542	0.260826245	0.260266934
40.5	0	0.251331889	0.251331889	0.251698897	0.251983609	0.250653276	0.250030218
41.5	0	0.243204534	0.243204534	0.243627565	0.244001608	0.244593438	0.245553138
42.5	0	0.235302633	0.235302633	0.235613387	0.23579563	0.236139453	0.233867097
43.5	0	0.22761166	0.22761166	0.227610373	0.227351166	0.229207053	0.228818306
44.5	0	0.220118522	0.220118522	0.220173175	0.220375996	0.220369503	0.220807312
45.5	0	0.212811394	0.212811394	0.212556689	0.212834393	0.213173473	0.213181878
46.5	0	0.205679587	0.205679587	0.205152318	0.205484984	0.206306027	0.205828515
47.5	0	0.198713428	0.198713428	0.198989842	0.198775233	0.199358159	0.199961673
48.5	0	0.191904153	0.191904153	0.192180261	0.191970499	0.192183874	0.192717488
49.5	0	0.185243823	0.185243823	0.185400903	0.185495056	0.186011642	0.184854563
50.5	0	0.178725233	0.178725233	0.1787572	0.17841168	0.178284071	0.181135802
51.5	0	0.172341847	0.172341847	0.172171642	0.172308568	0.172165559	0.17225744
52.5	0	0.166087735	0.166087735	0.166473086	0.166756348	0.166725149	0.167148427
53.5	0	0.159957513	0.159957513	0.160022923	0.16005302	0.159607843	0.160112504
54.5	0	0.153946295	0.153946295	0.154205862	0.154337225	0.154567307	0.154962176
55.5	0	0.14804965	0.14804965	0.148082251	0.148311346	0.148962587	0.15001101
56.5	0	0.142263559	0.142263559	0.142240069	0.142473513	0.142424135	0.142146872
57.5	0	0.136584382	0.136584382	0.13663854	0.13672152	0.137926326	0.138481037

58.5	0	0.131008824	0.131008824	0.131100045	0.131590681	0.131732334	0.132187983
59.5	0	0.125533907	0.125533907	0.125597184	0.125652543	0.125152774	0.124996111
60.5	0	0.120156946	0.120156946	0.120174708	0.120089666	0.119740403	0.119726921
61.5	0	0.11487552	0.11487552	0.11483693	0.114860503	0.115391298	0.114912175
62.5	0	0.109687458	0.109687458	0.109598441	0.109783185	0.109285083	0.108804888
63.5	0	0.104590815	0.104590815	0.104557819	0.104565894	0.104805851	0.10579348
64.5	0	0.099583856	0.099583856	0.0994039	0.099411265	0.099656567	0.099009201
65.5	0	0.094665041	0.094665041	0.094416381	0.094772309	0.095209744	0.096332924
66.5	0	0.089833009	0.089833009	0.0897079	0.089659886	0.090002252	0.09037366
67.5	0	0.085086568	0.085086568	0.085070498	0.085065749	0.084840847	0.083593371
68.5	0	0.08042468	0.08042468	0.080309297	0.0807196	0.081031062	0.080448055
69.5	0	0.075846452	0.075846452	0.075754748	0.075753835	0.076175645	0.076672259
70.5	0	0.071351126	0.071351126	0.071329434	0.071085171	0.071325255	0.071574376
71.5	0	0.066938069	0.066938069	0.066626713	0.066710924	0.066215299	0.065714276
72.5	0	0.062606767	0.062606767	0.062460861	0.0624551	0.062154685	0.061968261
73.5	0	0.058356817	0.058356817	0.058335851	0.058242591	0.058127726	0.058415398
74.5	0	0.054187916	0.054187916	0.054152203	0.054104874	0.054358808	0.054341745
75.5	0	0.050099863	0.050099863	0.050122086	0.050192415	0.050329079	0.050668702
76.5	0	0.046092546	0.046092546	0.046071958	0.046026667	0.04570991	0.045816612
77.5	0	0.04216594	0.04216594	0.042162318	0.042194394	0.04236529	0.042234132
78.5	0	0.038320102	0.038320102	0.038140056	0.03822168	0.037887008	0.037466876
79.5	0	0.034555168	0.034555168	0.034451904	0.034368498	0.034044215	0.034543816
80.5	0	0.030871346	0.030871346	0.03077183	0.030844603	0.030877424	0.031318758
81.5	0	0.027268917	0.027268917	0.027185602	0.027058313	0.026896485	0.02736777
82.5	0	0.023748228	0.023748228	0.023708983	0.023638925	0.023748528	0.024864435
83.5	0	0.020309691	0.020309691	0.020280376	0.020186622	0.020036082	0.019548657
84.5	0	0.016953781	0.016953781	0.01688991	0.01700048	0.017129313	0.016893513
85.5	0	0.013681031	0.013681031	0.013683423	0.013733691	0.013665799	0.013554049
86.5	0	0.010492036	0.010492036	0.010461816	0.010378322	0.010539697	0.010790155
87.5	0	0.007387445	0.007387445	0.007374348	0.007388748	0.007544322	0.007651446
88.5	0	0.004367963	0.004367963	0.004379269	0.004414403	0.004411938	0.004434566
89.5	0	0.001434352	0.001434352	0.001442989	0.001434366	0.001427584	0.00144932

표 3-12 원통형 노즐($r=1$, $l=4$)의 방사특성 데이터

3.3.5 원통형 노즐($r=1, l=6$)의 방사특성

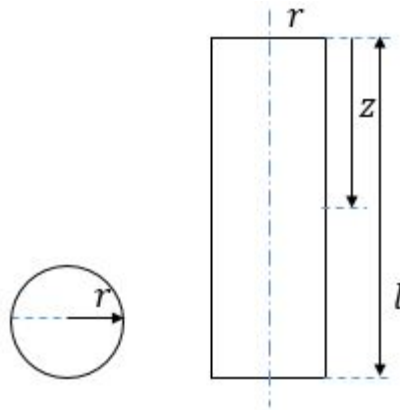


그림 3-25 원통형 노즐($r=1, l=6$)

다음은 원통형 노즐($r=1, l=6$)에 대한 몬테카를로 시뮬레이션 결과이다.

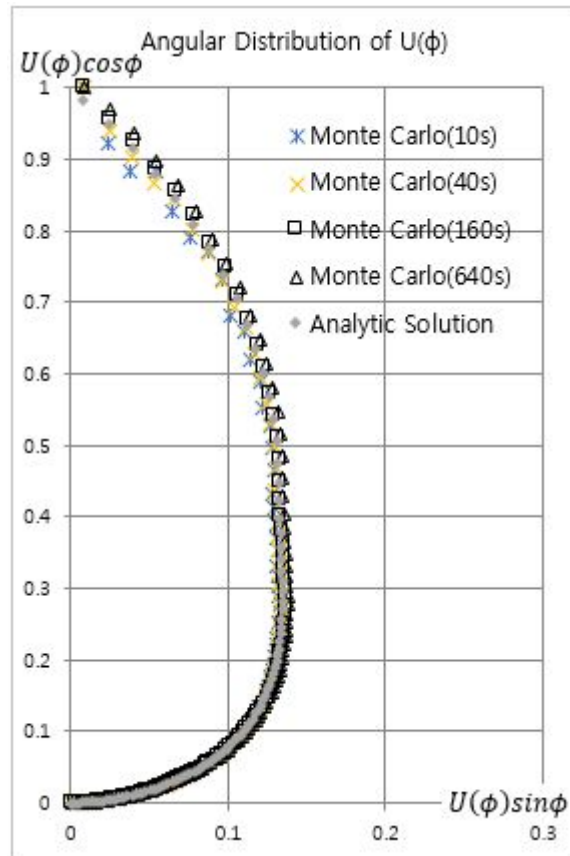


그림 3-26 원통형 노즐($r=1, l=6$)의 방사특성

몬테카를로 시뮬레이션에서 시뮬레이션 시간이 증가함에 따라 앞에서 계산한 해석적 해 (Analytic Solution)에 점점 수렴해가는 것을 볼 수 있다.

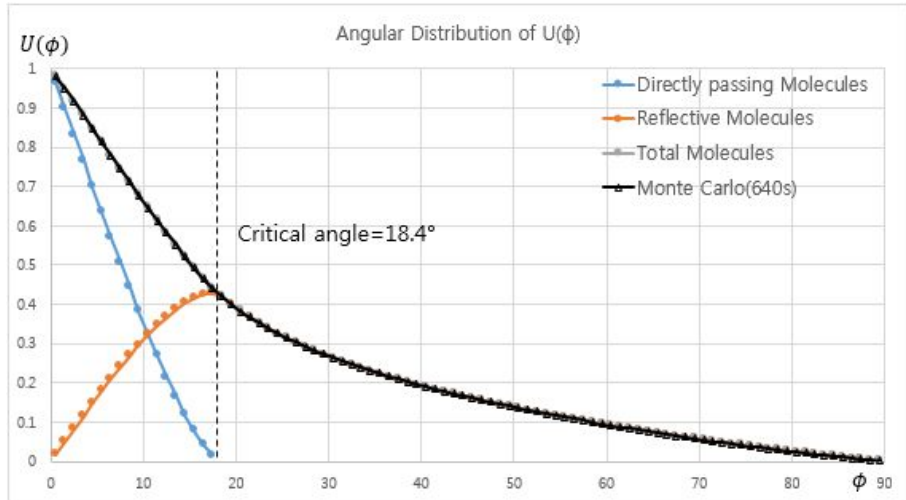


그림 3-27 원통형 노즐(r=1, l=4)의 방사특성

그림 3-27 은 본 논문에서 구한 노즐의 방사특성에 대한 해석적 해와 몬테카를로 시뮬레이션으로 구한 노즐의 방사특성의 값을 같이 나타낸 그래프이다. 두 그래프가 거의 일치하는 것을 확인할 수 있다.

simulation time		10s	40s	160s	640s
R1L6	RMSE	5.28E-03	3.34E-03	1.55E-03	1.21E-03
	Particle#	1.11E+06	4.45E+06	1.78E+07	7.11E+07

표 3-13 원통형 노즐(r=1, l=6)의 해석적 해에 대한 RMSE

이 두 그래프의 차이값은 시뮬레이션 시간 640s 기준으로 전체 구간에서 RMSE 가 1.21E-03 이다. 이 값은 평균 방사특성값 0.255631 의 0.47%에 해당한다.

φ[deg]	Analytic Solution			Monte Carlo Simulation			
	Directly passing Molecules	Reflective Molecules	Total Molecules	Monte Carlo(640s)	Monte Carlo(160s)	Monte Carlo(40s)	Monte Carlo(10s)
0.5	0.966633022	0.016663837	0.983296859	0.979796655	0.989296655	1.007296655	1.015296655
1.5	0.899771874	0.049923434	0.949695308	0.950505019	0.94527622	0.946277072	0.936981143
2.5	0.83291226	0.082978039	0.915890299	0.918004546	0.915675071	0.911473774	0.897226447
3.5	0.766261892	0.115688414	0.881950306	0.879957658	0.877990807	0.873430054	0.89736119
4.5	0.700033985	0.147911337	0.847945322	0.848123958	0.849857072	0.852846375	0.842894371
5.5	0.634449774	0.179497732	0.813947506	0.813439878	0.81685231	0.811402215	0.806204171
6.5	0.569741408	0.210290511	0.780031919	0.778344471	0.778557773	0.77911621	0.78777502
7.5	0.506155436	0.24012195	0.746277386	0.745397684	0.745993924	0.74047772	0.748833701
8.5	0.443957137	0.268810415	0.712767552	0.713017092	0.710272402	0.706979246	0.700884753
9.5	0.383436098	0.296156091	0.679592189	0.678216317	0.677809424	0.678820461	0.679311795
10.5	0.324913682	0.32193523	0.646848911	0.64585049	0.644759917	0.643778026	0.63966649
11.5	0.26875343	0.345892051	0.614645481	0.613175641	0.613793457	0.611407979	0.611093058
12.5	0.215376265	0.367726794	0.583103059	0.582909637	0.580032861	0.577144561	0.573843926
13.5	0.165283994	0.387077051	0.552361045	0.551699507	0.549786605	0.548189352	0.550504179
14.5	0.11909846	0.403486326	0.522584786	0.521608011	0.52159711	0.520926464	0.520032127
15.5	0.077633673	0.416345427	0.4939791	0.493365283	0.493867754	0.491074576	0.490394183
16.5	0.042050505	0.424765104	0.466815609	0.464666409	0.46462453	0.459314981	0.457452325
17.5	0.014290151	0.427213757	0.441503909	0.440289695	0.440375739	0.437804279	0.438090648
18.5	0	0.41901247	0.41901247	0.418702219	0.417439231	0.417953978	0.417885471
19.5	0	0.399946608	0.399946608	0.399529258	0.400129867	0.399527237	0.399107514
20.5	0	0.382509096	0.382509096	0.381381851	0.383147195	0.380116862	0.383800946
21.5	0	0.366470316	0.366470316	0.366079358	0.366019093	0.365499147	0.361733696
22.5	0	0.351641624	0.351641624	0.352092578	0.351182413	0.350393932	0.34982912
23.5	0	0.337866637	0.337866637	0.337831746	0.337715996	0.335077642	0.335752163
24.5	0	0.325014652	0.325014652	0.325371534	0.325767981	0.324402283	0.324169948
25.5	0	0.312975609	0.312975609	0.314360825	0.314863884	0.312860057	0.312881934
26.5	0	0.301656199	0.301656199	0.303070748	0.302666364	0.30339102	0.30270422
27.5	0	0.290976818	0.290976818	0.292257101	0.292764592	0.291954706	0.289882074
28.5	0	0.280869168	0.280869168	0.282245184	0.282104438	0.280636693	0.28415693
29.5	0	0.271274334	0.271274334	0.272573662	0.272510752	0.269780562	0.268729928
30.5	0	0.262141257	0.262141257	0.263528871	0.264561807	0.263779603	0.260842581
31.5	0	0.253425477	0.253425477	0.25478381	0.255422018	0.254360036	0.254814434
32.5	0	0.245088129	0.245088129	0.246528532	0.246200085	0.245366845	0.245156125
33.5	0	0.237095099	0.237095099	0.238834823	0.238788604	0.238450613	0.237172017
34.5	0	0.229416344	0.229416344	0.231478324	0.230680756	0.230390895	0.229095702
35.5	0	0.222025315	0.222025315	0.224038179	0.223907546	0.223336562	0.221013768
36.5	0	0.21489848	0.21489848	0.216807842	0.216778791	0.215104958	0.218720326
37.5	0	0.208014924	0.208014924	0.210102637	0.209966047	0.20915975	0.209842048
38.5	0	0.201356005	0.201356005	0.203039553	0.203703084	0.202509834	0.202667707
39.5	0	0.194905075	0.194905075	0.196636317	0.19718452	0.197179305	0.200242471
40.5	0	0.188647224	0.188647224	0.190519779	0.190590232	0.190588572	0.191927545
41.5	0	0.182569079	0.182569079	0.184288954	0.183660936	0.182934384	0.183023563
42.5	0	0.176658621	0.176658621	0.178564118	0.178641654	0.179203029	0.179666451
43.5	0	0.170905029	0.170905029	0.172447049	0.171830596	0.171400429	0.173588416
44.5	0	0.165298547	0.165298547	0.16715082	0.166929398	0.166180968	0.165577788
45.5	0	0.159830366	0.159830366	0.161716834	0.161353645	0.162046703	0.160457883
46.5	0	0.154492524	0.154492524	0.156218366	0.156345048	0.156650999	0.157114697
47.5	0	0.149277817	0.149277817	0.150885817	0.150588252	0.15009992	0.151009353
48.5	0	0.144179718	0.144179718	0.145898756	0.145534854	0.145651405	0.146403622
49.5	0	0.139192313	0.139192313	0.140633376	0.140733549	0.140595462	0.141184096
50.5	0	0.134310241	0.134310241	0.135857548	0.135942286	0.13490039	0.135849464
51.5	0	0.129528635	0.129528635	0.130901825	0.13115582	0.129810874	0.12815611
52.5	0	0.12484308	0.12484308	0.126145734	0.126073383	0.12519104	0.126740459
53.5	0	0.120249571	0.120249571	0.121615422	0.121198438	0.121204965	0.120266727
54.5	0	0.115744472	0.115744472	0.116815513	0.11740376	0.117083983	0.117035615
55.5	0	0.111324487	0.111324487	0.112422255	0.112059684	0.112476702	0.112267194
56.5	0	0.106986628	0.106986628	0.108194092	0.107644202	0.106692477	0.108576155
57.5	0	0.102728187	0.102728187	0.103852562	0.103075942	0.102521993	0.103036581

58.5	0	0.098546717	0.098546717	0.099604956	0.099415405	0.099361696	0.099395567
59.5	0	0.094440006	0.094440006	0.095349004	0.095664	0.095262292	0.094346987
60.5	0	0.090406057	0.090406057	0.091204996	0.091216218	0.090557568	0.089672766
61.5	0	0.086443076	0.086443076	0.087186313	0.086770613	0.0860605	0.086425397
62.5	0	0.082549452	0.082549452	0.08347229	0.082810967	0.082618498	0.082557293
63.5	0	0.078723741	0.078723741	0.079427254	0.079138568	0.078735164	0.078121661
64.5	0	0.074964659	0.074964659	0.075682879	0.075446521	0.075497676	0.075880717
65.5	0	0.071271066	0.071271066	0.071989006	0.071857698	0.07092517	0.070707376
66.5	0	0.067641956	0.067641956	0.068215666	0.068095744	0.068050541	0.067413947
67.5	0	0.064076448	0.064076448	0.064654294	0.064878707	0.064535231	0.064457755
68.5	0	0.060573776	0.060573776	0.061149799	0.060897709	0.06104251	0.061919841
69.5	0	0.057133283	0.057133283	0.057591542	0.057666284	0.05766681	0.057153404
70.5	0	0.053754412	0.053754412	0.05413187	0.053821258	0.053708585	0.054022623
71.5	0	0.0504367	0.0504367	0.050801049	0.050602265	0.050455152	0.051273961
72.5	0	0.047179772	0.047179772	0.047449396	0.047559449	0.047363912	0.047781325
73.5	0	0.043983336	0.043983336	0.044380282	0.044336738	0.044453328	0.043436474
74.5	0	0.040847176	0.040847176	0.041204258	0.041164753	0.040960089	0.040320749
75.5	0	0.037771149	0.037771149	0.038103928	0.037900467	0.037860942	0.037589722
76.5	0	0.034755181	0.034755181	0.035013635	0.035077641	0.034764849	0.035250117
77.5	0	0.031799261	0.031799261	0.032001502	0.031787073	0.03163829	0.031235531
78.5	0	0.028903443	0.028903443	0.029068075	0.029143187	0.028946876	0.028729905
79.5	0	0.026067834	0.026067834	0.026245217	0.026140124	0.0258886	0.025949414
80.5	0	0.0232926	0.0232926	0.023458305	0.023332679	0.023219201	0.023316324
81.5	0	0.020577958	0.020577958	0.020711324	0.020657888	0.020392258	0.020705654
82.5	0	0.017924176	0.017924176	0.018139419	0.018034103	0.01778194	0.01774488
83.5	0	0.01533157	0.01533157	0.015525521	0.015547235	0.01535944	0.015115467
84.5	0	0.012800503	0.012800503	0.012879435	0.012870393	0.012786413	0.012947554
85.5	0	0.010331382	0.010331382	0.010401117	0.010315683	0.010424092	0.010472437
86.5	0	0.007924658	0.007924658	0.007997006	0.007955177	0.007924735	0.007908353
87.5	0	0.005580825	0.005580825	0.005565317	0.005653527	0.005630882	0.005853468
88.5	0	0.003300417	0.003300417	0.003324149	0.00325038	0.003250475	0.003189572
89.5	0	0.001084012	0.001084012	0.001091247	0.001082835	0.001111387	0.001058164

표 3-14 원통형 노즐($r=1$, $l=6$)의 방사특성 데이터

제 4 장. 원뿔형 노즐의 방사특성

4.1 원뿔형 노즐의 방사특성 계산

4.1.1 원뿔형 노즐의 방사특성 계산 방법

원뿔형 노즐의 방사특성 계산 방법도 3.1.2 에서 설명한 원통형 노즐의 방사특성 계산의 경우처럼 노즐 입구에 입사된 분자가 노즐 벽면에 충돌한 후 방출하는 분자와 노즐 입구에서 직접 노즐 출구로 방출되는 분자로 나뉘어서 계산할 수 있다.

원통형 노즐과 원뿔형 노즐의 차이점은 임계각의 개수에 있다. 원뿔형 노즐에서는 임계각이 두 개 존재한다. 다음은 원통형 노즐과 원뿔형 노즐을 비교한 그림이다.

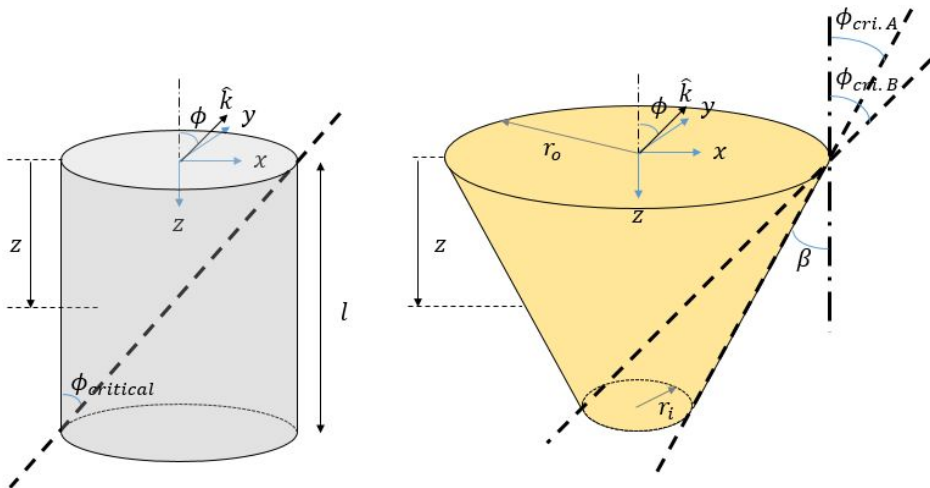


그림 4-1 원통형 노즐과 원뿔형 노즐의 임계각(criticla angle)

원통형 노즐의 경우 ϕ 가 0° 보다 큰 경우 노즐 출구를 통해 항상 노즐 입구의 일부만 보이고, ϕ 가 점점 커지면 노즐 출구를 통해 보이는

노즐 입구가 완전히 없어지는 각도인 $\phi_{\text{critical angle}}$ 각도가 한 개만 존재한다. 원뿔형 노즐의 경우 노즐 출구가 노즐 입구보다 크기 때문에 ϕ 가 작을 때는 노즐 출구를 통해 노즐 입구 전체가 보이는 구간이 존재한다. 이때 ϕ 가 점점 커지면 노즐 입구의 일부가 사라지는 각도가 존재하는데 이 각도를 $\phi_{\text{critical A}}$ 라고 정의하고, ϕ 가 더 커지면 노즐 입구가 완전히 사라지는 각도가 존재하는데 이 각도를 $\phi_{\text{critical B}}$ 라고 정의하였다. 원뿔형 노즐의 taper angle 을 β 라고 정의하면 $\phi_{\text{critical A}}$ 는 β 와 동일하다.

방사특성을 계산하기 위해서 임계각에 따른 노즐의 방사특성은 노즐 입구 영역의 전체 혹은 일부, 노즐 벽면 영역의 전체 혹은 일부 영역의 방출로 다음과 같이 정리할 수 있다.

원통형 노즐의 경우 :

- i) $\tan \phi < 2r/l$ 인 경우 : 입구 일부 영역의 방출 + 벽면 일부 영역의 방출
- ii) $\tan \phi > 2r/l$ 인 경우 : 벽면 일부 영역의 방출만 존재함

원뿔형 노즐의 경우 :

- i) $\tan \phi < (r_o - r_i)/l$ 인 경우 : 입구 전체 영역의 방출 + 벽면 전체 영역의 방출
- ii) $(r_o - r_i)/l < \tan \phi < (r_o + r_i)/l$: 입구 일부 영역의 방출 + 벽면 일부 영역의 방출
- iii) $\tan \phi > (r_o + r_i)/l$: 벽면 일부 영역의 방출만 존재함

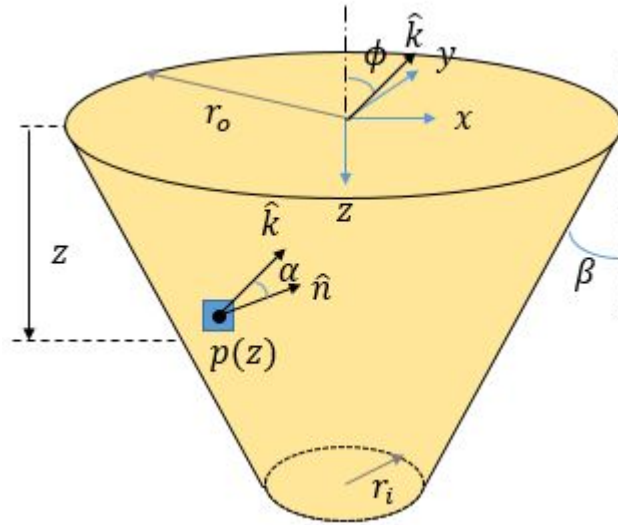


그림 4-2 원통형 노즐

원뿔형 노즐의 또 다른 특징으로는 벽면의 미소면적에 수직한 방향벡터 n 의 방향이다. 원통형 노즐에서는 식 (3.2)에서처럼 벽면이 수직하기때문에 z 방향 성분이 0 이지만, 원뿔형 노즐의 벽면이 β 만큼 기울어져 있기 때문에 미소면적에 수직한 방향벡터 n 은 다음과 같이 XYZ 방향 성분을 갖는 벡터가 된다. 벡터 k 는 노즐의 방사특성을 계산할 방향이다.

$$\hat{k} = (\sin\phi, 0, -\cos\phi) \quad (4.1)$$

$$\hat{n} = (\cos\theta\cos\beta, \sin\theta\cos\beta, -\sin\beta) \quad (4.2)$$

식 (3.3)과 동일하게 노즐의 미소면적에서 방사특성이 되는 $\cos\alpha$ 를 구해보면 다음과 같다.

$$\widehat{k} \circ \widehat{n} = \left| \widehat{k} \right| \left| \widehat{n} \right| \cos \alpha = \cos \theta \sin \phi \cos \beta + \cos \phi \sin \beta \quad (4.3)$$

벡터 k 와 벡터 n 은 단위벡터로 정의하였기 때문에 벽면의 방사특성이 되는 $\cos \alpha$ 는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\cos \alpha = \cos \theta \sin \phi \cos \beta + \cos \phi \sin \beta \quad (4.4)$$

4.1.2 노즐 입구 전체에서 노즐 출구로 방출되는 분자, $\tan \phi < (r_o - r_i) / l$

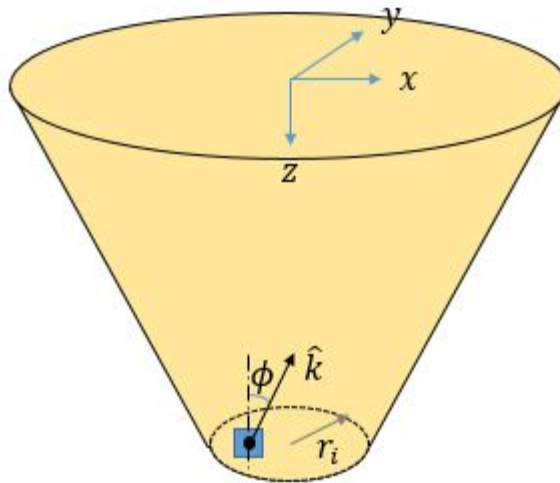


그림 4-3 노즐 입구에서 방출되는 분자

앞에서 설명한것처럼 노즐의 방출각도 ϕ 가 $\phi_{\text{critical A}}$ 보다 작은 경우 노즐 출구 방향에서 노즐 입구 전체를 볼 수 있다. 즉 노즐 입구 면적 전체에서 노즐 출구 방향으로 분자의 방출이 일어난다. 이때 노즐

입구에서 노즐 출구로의 방사 특성은 다음과 같은 간단한 계산을 통해 구할 수 있다. c 는 입구에서 분자밀도 이고, r_i 는 원통형 노즐 입구 반경이다.

$$u_1(\phi) = c * \pi r_i^2 \cos\phi \quad (4.5)$$

4.1.3 노즐 벽면 전체에서 노즐 출구로 방출되는 분자, $\tan\phi < (r_o - r_i)/l$

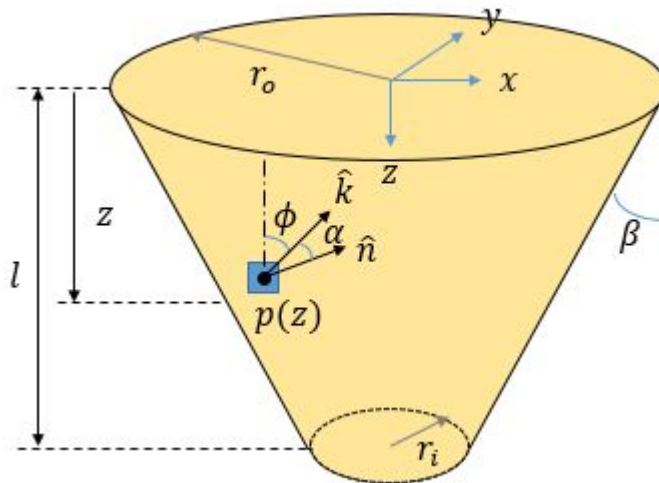


그림 4-4 노즐 벽면에서 방출되는 분자

앞에서 노즐의 방출각도 ϕ 가 $\phi_{\text{critical A}}$ 보다 작은 경우 노즐 출구 방향에서 노즐 입구 전체를 볼 수 있다고 설명했는데, 노즐 입구 면적 전체가 보인다는 것은 다른 의미로는 노즐 벽면 전체의 면적이 보인다는 의미도 된다. 즉 노즐 벽면 면적 전체에서도 노즐 출구 방향으로 분자의 방출이 일어난다. 노즐 벽면에서의 방출은 다음과 같은 계산을 통해 구할 수 있다. 이때 $r/\cos\beta * d\theta dz$ 는 미소면적이 된다.

$$u_2(\phi) = \int_0^l \int_{-\pi}^{\pi} p(z) \cos\alpha \frac{r}{\cos\beta} d\theta dz \quad (4.6)$$

일반적으로 원뿔형 노즐에의 노즐 벽면에서의 압력은 다음과 같은 형태의 함수형태라고 알려져 있다. 이때 r 은 식(4.10)과 같이 z 에 관한 함수이다.

$$p(z) = \frac{K}{r^2} + C_0 \quad (4.7)$$

식 (4.4), (4.7)을 식 (4.6)에 대입하면 노즐 벽면에서의 방사특성은 다음과 같다

$$u_2(\phi) = \int_0^l \int_{-\pi}^{\pi} \left(\frac{K}{r^2} + C_0 \right) (\cos\theta \sin\phi \cos\beta + \cos\phi \sin\beta) \frac{r}{\cos\beta} d\theta dz \quad (4.8)$$

$d\theta$ 에 관해서 적분을 하면 다음과 같다.

$$u_2(\phi) = \int_0^l 2\pi \left(\frac{K}{r^2} + C_0 \right) \cos\phi \sin\beta \frac{r}{\cos\beta} dz \quad (4.9)$$

여기서 r 은 노즐 출구에서 z 만큼 떨어진 위치에서 노즐의 반경으로 다음과 같이 z 에 관한 함수로 나타낼 수 있다.

$$r = r_o - z \tan\beta \quad (4.10)$$

식(4.10)을 (4.9)에 대입하면 다음과 같다.

$$u_2(\phi) = \int_0^l 2\pi \left(\frac{K}{r_o - z \tan\beta} + C_0(r_o - z \tan\beta) \right) \cos\phi \tan\beta dz \quad (4.11)$$

dz 에 관해서 적분을 하면 다음과 같다.

$$u_2(\phi) = 2\pi \left(-\frac{K}{\tan\alpha} \frac{\ln r_i}{\ln r_o} + C_0 r_o l - \frac{1}{2} C_0 \tan\alpha l^2 \right) \cos\phi \tan\beta \quad (4.12)$$

4.1.4 노즐 입구 일부에서 노즐 출구로 방출되는 분자,

$$(r_o - r_i) / l < \tan \phi < (r_o + r_i) / l$$

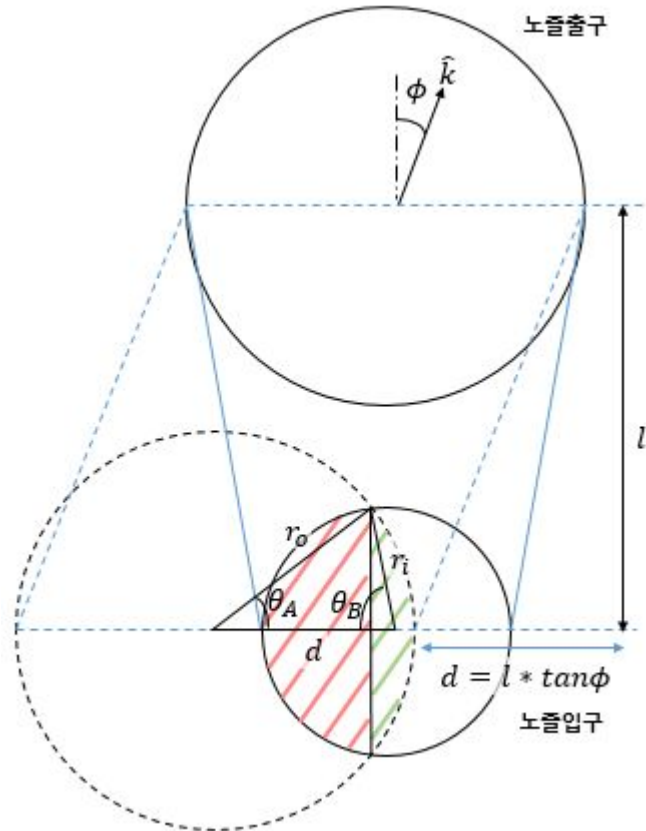


그림 4-5 노즐 입구에서 분자 방출 영역

노즐의 방출 각도 ϕ 가 $\phi_{\text{critical A}}$ 보다 크고 $\phi_{\text{critical B}}$ 보다 작은 경우 노즐 입구 영역의 일부 영역에서 노즐 출구 방향으로 분자를 방출한다. 이때 분자를 방출할 수 있는 노즐 입구의 영역은, $-k$ 방향으로 노즐 출구를 통해 노즐 내부를 바라봤을 때 보이는 노즐 입구의 면적이 된다. 그림 4-5의 실선은 실제 원뿔형 노즐의 입구, 벽면, 출구의 경계를 나타내고 있다. 점선은 $-k$ 방향으로 노즐 출구를 통해 노즐 내부를 바라봤을 때 노즐 출구의 경계가 만드는 가상의 원통이다. 노즐

입구에서 가상의 원과 노즐 입구의 원이 겹쳐지는 영역이 노즐 출구로 분자를 방출할 수 있는 영역이 된다.

겹쳐지는 영역의 넓이는 다음과 같은 방법으로 구할 수 있다. 먼저 녹색으로 표기한 오른쪽 부분의 넓이는 θ_A 가 만드는 부채꼴의 넓이에서 θ_A 가 만드는 직각삼각형의 넓이를 빼는 방법으로 구할 수 있다. 나머지 반쪽인 빨간색으로 표기한 부분의 넓이는 θ_B 를 이용해서 구할 수 있다. 이러한 방법으로 겹쳐지는 영역의 넓이를 구해보면 다음과 같다.

$$S = \frac{1}{2}r_o^2(2\theta_A - \sin 2\theta_A) - \frac{1}{2}r_i^2(2\theta_B - \sin 2\theta_B) \quad (4.14)$$

이때 θ_A, θ_B 는 r_o, r_i 두 원의 중심거리 d 가 만드는 삼각형에서 코사인 제 2 법칙을 이용하여 구할 수 있다. 이때 d 는 노즐 중심의 이동거리가 되고 이는 $l \cdot \tan \phi$ 가 된다. 이러한 방법으로 $\cos \theta_A, \cos \theta_B$ 를 구해보면 다음과 같다.

$$\cos \theta_A = \frac{r_o^2 + (l \tan \phi)^2 - r_i^2}{2r_o(l \tan \phi)} \quad (4.15)$$

$$\cos \theta_B = \frac{r_i^2 + (l \tan \phi)^2 - r_o^2}{2r_i(l \tan \phi)} \quad (4.16)$$

식 (4.15)과 식 (4.16)을 식 (4.14)에 대입하면 노즐 출구에서 보이는 노즐 입구의 면적을 구할 수 있다.

$$S =$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} r_o^2 \left(2 \cos^{-1} \left(\frac{r_o^2 + (l \tan \phi)^2 - r_i^2}{2 r_o (l \tan \phi)} \right) \right. \\ & \left. - \sin \left(2 \cos^{-1} \left(\frac{r_o^2 + (l \tan \phi)^2 - r_i^2}{2 r_o (l \tan \phi)} \right) \right) \right) \\ & + \frac{1}{2} r_i^2 \left(2 \cos^{-1} \left(\frac{r_i^2 + (l \tan \phi)^2 - r_o^2}{2 r_i (l \tan \phi)} \right) \right. \\ & \left. - \sin \left(2 \cos^{-1} \left(\frac{r_i^2 + (l \tan \phi)^2 - r_o^2}{2 r_i (l \tan \phi)} \right) \right) \right) \end{aligned} \quad (4.17)$$

이때 노즐의 방사특성은 다음과 같이 나타낼 수 있다. c 는 입구의 분자 밀도 이다

$$u_1(\phi) = c * S \cos \phi \quad (4.18)$$

4.1.5 노즐 벽면 일부에서 노즐 출구로 방출되는 분자,

$$(r_o - r_i) / l < \tan \phi < (r_o + r_i) / l$$

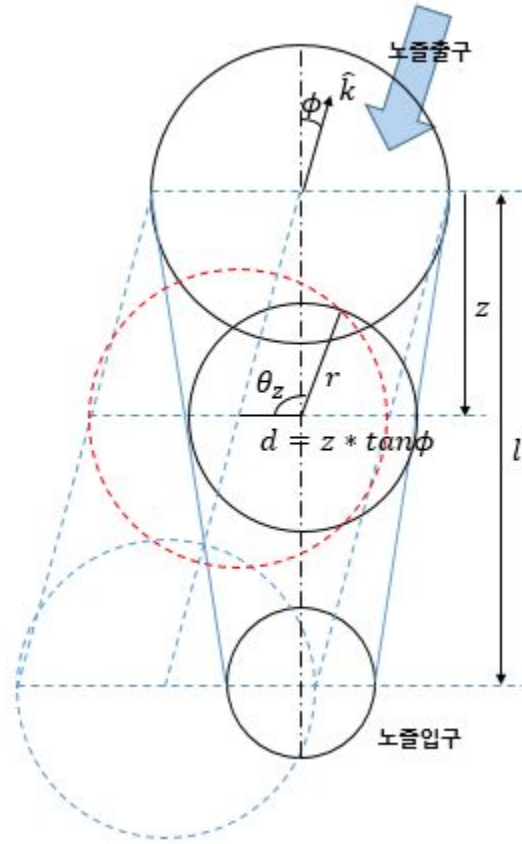


그림 4-6 노즐 벽면에서 분자 방출 영역

노즐의 방출 각도 ϕ 가 $\phi_{\text{critical A}}$ 보다 크고 $\phi_{\text{critical B}}$ 보다 작은 경우 노즐 벽면의 일부 영역에서 노즐 출구 방향으로 분자를 방출한다. 이때 분자를 방출할 수 있는 노즐 벽면의 영역은, $-k$ 방향으로 노즐 출구를 통해 노즐 내부를 바라봤을 때 보이는 노즐 벽면의 면적이 된다. 그림 4-6의 실선은 실제 원뿔형 노즐의 입구, 벽면, 출구의 경계를 나타내고 있다. 점선은 $-k$ 방향에서 노즐 출구를 통해 노즐 내부를 바라봤을 때 노즐 출구의 경계가 만드는 가상의 원통이다. 이 가상의 원통과 실제 노즐이 겹치는 부분이 k 방향으로 분자를 방출할 수 있는 영역이 된다.

그림 4-6 에서 노즐 출구에서 z 만큼 떨어진 위치를 보면 실제 노즐의에 해당하는 부분의 노즐 반경이 r 이고, 반지름이 r_0 인 가상의 원통과 두 점에서 만나는 것을 볼 수 있다. 이때 노즐의 중심에서 교점이 만드는 각도를 θ_z 라고 정의하면, 노즐 출구에서 z 만큼 떨어진 노즐의 벽면에서 노즐 출구로 분자를 방출할 수 있는 부분은 $\theta_z \sim -\theta_z$ 사이의 원호에 해당하는 부분이 된다. 이러한 미소면적들을 적분하면 노즐 내부 벽면 전체에서 노즐 출구로 방출하는 분자의 수를 구할 수 있다. 이 식은 식 (4.8)과 동일하고 적분 구간만 $\pi \sim -\pi$ 에서 $\theta_z \sim -\theta_z$ 로 차이가 있다.

$$u_2(\phi) = \int_0^l \int_{-\theta_z}^{\theta_z} \left(\frac{K}{r^2} + C_0 \right) (\cos\theta \sin\phi \cos\beta + \cos\phi \sin\beta) \frac{r}{\cos\beta} d\theta dz$$

(4.19)

이 식은 자체로 적분이 힘들기 때문에 다음과 같이 네 부분으로 나눠서 각각을 계산 하였다..

$$u_2(\phi) = u_{2A}(\phi) + u_{2B}(\phi) + u_{2C}(\phi) + u_{2D}(\phi) \quad (4.20)$$

$$u_{2A}(\phi) = \int_0^l \int_{-\theta_z}^{\theta_z} \left(\frac{K}{r^2}\right) (\cos\theta \sin\phi \cos\beta) \frac{r}{\cos\beta} d\theta dz$$

(4.21)

$$u_{2B}(\phi) = \int_0^l \int_{-\theta_z}^{\theta_z} (C_0) (\cos\theta \sin\phi \cos\beta) \frac{r}{\cos\beta} d\theta dz$$

(4.22)

$$u_{2C}(\phi) = \int_0^l \int_{-\theta_z}^{\theta_z} \left(\frac{K}{r^2}\right) (\cos\phi \sin\beta) \frac{r}{\cos\beta} d\theta dz$$

(4.23)

$$u_{2D}(\phi) = \int_0^l \int_{-\theta_z}^{\theta_z} (C_0) (\cos\phi \sin\beta) \frac{r}{\cos\beta} d\theta dz$$

(4.24)

먼저 U_{2A} 는 다음과 같이 계산할 수 있다.

$$u_{2A}(\phi) = \int_0^l \int_{-\theta_z}^{\theta_z} \left(\frac{K}{r^2}\right) (\cos\theta \sin\phi \cos\beta) \frac{r}{\cos\beta} d\theta dz$$

(4.25)

$$u_{2A}(\phi) = \int_0^l \int_{-\theta_z}^{\theta_z} \left(\frac{K}{r}\right) (\cos\theta \sin\phi) d\theta dz$$

(4.26)

먼저 $d\theta$ 에 대해서 적분을 하면 다음과 같다.

$$u_{2A}(\phi) = \int_0^l \frac{K}{r} 2\sin\theta_z \sin\phi dz \quad (4.27)$$

dz 에 대해서 적분하기 어렵기 때문에 dz 를 $d\theta_z$ 로 치환하도록 한다.
 dz 는 다음과 같은 과정을 통해 구할 수 있다.

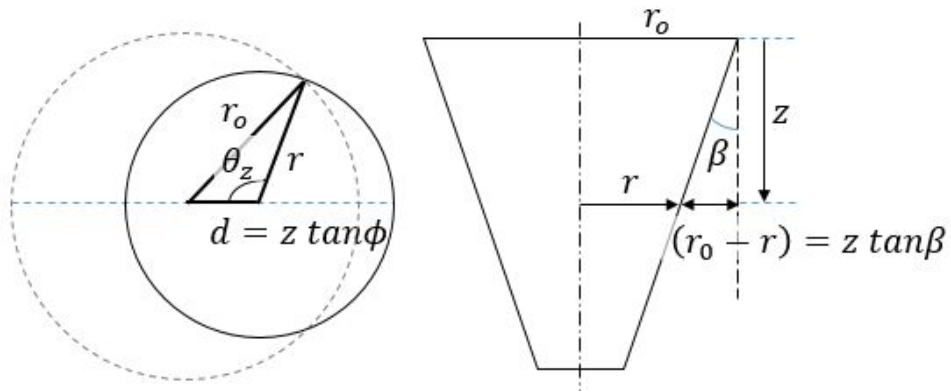


그림 4-7 노즐 출구에서 z 만큼 떨어진 위치에서 노즐 단면

그림 4-7 의 왼쪽 그림은 노즐 출구에서 z 만큼 떨어진 위치에서의 노즐 단면이다. 점선으로 그려진 원은 그림 4-6 에서 설명한 노즐 출구가 이동한 위치이고, 실선으로 그려진 원은 해당 위치에서 노즐 단면이다. 이때 d 는 다음과 같다.

$$d = z \tan\phi \quad (4.28)$$

제 2 코사인 법칙에 의해서 r 과 r_0 , d 의 관계는 다음과 같다.

$$r_o^2 = r^2 + d^2 - 2rd \cos\theta_z \quad (4.29)$$

$\cos\theta_z$ 에 관해서 정리하면 다음과 같다.

$$\cos\theta_z = \frac{(r_o+r)(-r_o+r)+d^2}{2rd} \quad (4.30)$$

그림 4-7 의 오른쪽 그림은 노즐의 종단면을 표시한 그림이다. β 는 원뿔형 노즐의 taper angle 이다. 기하학적으로 r_o-r 은 다음과 같다.

$$(r_o - r) = z \tan\beta = \frac{\tan\beta}{\tan\phi} d \quad (4.31)$$

식 (4.28)과 식 (4.31)을 식 (4.30)에 대입해서 정리하면 $\cos\theta_z$ 는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\cos\theta_z = \frac{1}{r} \frac{r_o}{2} \left(-\frac{\tan\beta}{\tan\phi} + \frac{\tan\phi}{\tan\beta} \right) + \frac{1}{2} \left(-\frac{\tan\beta}{\tan\phi} - \frac{\tan\phi}{\tan\beta} \right) \quad (4.32)$$

C_A 와 C_B 를 다음과 같이 정의하면 식(4.33)은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$C_A = \frac{r_o}{2} \left(-\frac{\tan\beta}{\tan\phi} + \frac{\tan\phi}{\tan\beta} \right) \quad (4.33)$$

$$C_B = \frac{1}{2} \left(-\frac{\tan\beta}{\tan\phi} - \frac{\tan\phi}{\tan\beta} \right) \quad (4.34)$$

$$\cos\theta_z = \frac{1}{r} C_A + C_B \quad (4.35)$$

식(4.31)과 식(4.35)를 미분하면 각각 다음과 같다.

$$-dr = \tan\beta dz \quad (4.36)$$

$$-\sin\theta_z d\theta_z = -\frac{1}{r^2} C_A dr \quad (4.37)$$

식(4.36)과 식(4.37)의 관계를 이용하면 dz 는 다음과 같다.

$$dz = \frac{-r^2}{C_A \tan\beta} \sin\theta_z d\theta_z \quad (4.38)$$

식(4.38)을 식(4.27)에 대입하면 다음과 같다.

$$u_{2A}(\phi) = \int_{\theta_0}^{\theta_1} \frac{K}{r} 2\sin\theta_z \sin\phi \left(\frac{-r^2}{C_A \tan\beta} \sin\theta_z d\theta_z \right) \quad (4.39)$$

θ_1 과 θ_0 은 $z=1$ 일때와 $z=0$ 일때에 해당하는 θ_z 로 식(4.35)를

이용하면 다음과 같이 구할 수 있다.

$$\theta_l = \cos^{-1} \left(\frac{1}{r_l} C_A + C_B \right) \quad (4.40)$$

$$\theta_0 = \cos^{-1} \left(\frac{1}{r_o} C_A + C_B \right) \quad (4.41)$$

식 (4.39)에 식(4.35)를 대입해서 정리하면 다음과 같이 간단하게 나타낼 수 있다.

$$u_{2A}(\phi) = -\frac{2K \sin \phi}{\tan \beta} \int_{\theta_0}^{\theta_l} \frac{\sin^2 \theta_z}{\cos \theta_z - C_B} d\theta_z \quad (4.42)$$

식 (4.42)의 적분은 바이어슈트라스 치환(weierstrass substitution)을 이용하면 다음과 같이 구할 수 있다.

$$u_{2A}(\phi) = -\frac{2K \sin \phi}{\tan \beta} \left[2 \frac{\sqrt{C_B - 1}}{\sqrt{C_B + 1}} (C_B + 1) \right. \\ \left. \times \tan^{-1} \left(\frac{\tan \left(\frac{\theta_z}{2} \right)}{\sqrt{\frac{C_B - 1}{C_B + 1}}} \right) - C_B \theta_z - \sin \theta_z \right]_{\theta_0}^{\theta_l} \quad (4.43)$$

다음으로 U_{2B} 는 다음과 같이 계산할 수 있다.

$$u_{2B}(\phi) = \int_0^l \int_{-\theta_z}^{\theta_z} (C_0)(\cos\theta \sin\phi \cos\beta) \frac{r}{\cos\beta} d\theta dz \quad (4.44)$$

$d\theta$ 에 대해서 적분을 하면 다음과 같다.

$$u_{2B}(\phi) = \int_0^l 2C_0 \sin\theta_z \sin\phi r dz \quad (4.45)$$

식(4.45)에 식(4.38)을 대입하면 다음과 같다.

$$u_{2B}(\phi) = \int_{\theta_0}^{\theta_l} 2C_0 \sin\theta_z \sin\phi r \left(\frac{-r^2}{C_A \tan\beta} \sin\theta_z d\theta_z \right) \quad (4.46)$$

식 (4.46)에 식 (4.35)를 대입하면 다음과 같이 정리할 수 있다.

$$u_{2B}(\phi) = -2C_0 C_A^2 \frac{\sin\phi}{\tan\beta} \int_{\theta_0}^{\theta_l} \frac{\sin^2\theta_z}{(\cos\theta_z - C_B)^3} d\theta_z \quad (4.47)$$

식 (4.47)의 적분은 바이어슈트라스 치환을 이용하면 다음과 같이 구할 수 있다.

$$u_{2B}(\phi) = -2C_0 C_A^2 \frac{\sin\phi}{\tan\beta} \left[\frac{\sin\theta_z (C_B \cos\theta_z - 1)}{2(C_B^2 - 1)(C_B - \cos\theta_z)^2} + \frac{\left(\frac{C_B - 1}{C_B + 1}\right)^{\frac{3}{2}} \tan^{-1}\left(\frac{\tan\left(\frac{\theta_z}{2}\right)}{\sqrt{\frac{C_B - 1}{C_B + 1}}}\right)}{(C_B - 1)^3} \right]_{\theta_0}^{\theta_l} \quad (4.48)$$

다음으로 U_{2C} 는 다음과 같이 계산할 수 있다.

$$u_{2C}(\phi) = \int_0^l \int_{-\theta_z}^{\theta_z} \left(\frac{K}{r^2}\right) (\cos\phi \sin\beta) \frac{r}{\cos\beta} d\theta dz \quad (4.49)$$

$d\theta$ 에 대해서 적분을 하면 다음과 같다.

$$u_{2C}(\phi) = \int_0^l K \cos\phi \frac{\sin\beta}{\cos\beta} \frac{2\theta_z}{r} dz \quad (4.50)$$

식 (4.50)에 식 (4.38)을 대입하면 다음과 같다.

$$u_{2C}(\phi) = \int_{\theta_0}^{\theta_l} K \cos\phi \frac{\sin\beta}{\cos\beta} \frac{2\theta_z}{r} \left(\frac{-r^2}{C_A \tan\beta} \sin\theta_z d\theta_z \right) \quad (4.51)$$

식 (4.51)에 식 (4.35)를 대입하면 다음과 같이 정리할 수 있다.

$$u_{2C}(\phi) = -2K \cos\phi \int_{\theta_0}^{\theta_l} \frac{\theta_z \sin\theta_z}{\cos\theta_z - C_B} d\theta_z \quad (4.52)$$

식 (4.52)의 적분은 초등함수의 형태로 적분이 어려워 필요한 경우 수치적분법을 사용하도록 한다. 본 논문에서는 간단하게 구분구적법을 사용하였다.

$$u_{2C}(\phi) = -2K \cos\phi \int_{\theta_0}^{\theta_l} \frac{\theta_z \sin\theta_z}{\cos\theta_z - C_B} d\theta_z \quad (4.53)$$

다음으로 U_{2D} 는 다음과 같이 계산할 수 있다.

$$u_{2D}(\phi) = \int_0^l \int_{-\theta_z}^{\theta_z} (C_0)(\cos\phi \sin\beta) \frac{r}{\cos\beta} d\theta dz \quad (4.54)$$

$d\theta$ 에 대해서 적분을 하면 다음과 같다.

$$u_{2D}(\phi) = \int_0^l 2C_0 \cos\phi \frac{\sin\beta}{\cos\beta} r\theta_z dz \quad (4.55)$$

식 (4.55)에 식 (4.38)을 대입하면 다음과 같다.

$$u_{2D}(\phi) = \int_{\theta_0}^{\theta_1} 2C_0 \cos\phi \frac{\sin\beta}{\cos\beta} r\theta_z \left(\frac{-r^2}{C_A \tan\beta} \sin\theta_z d\theta_z \right) \quad (4.56)$$

식(4.56)에 식(4.35)를 대입하면 다음과 같이 정리할 수 있다.

$$u_{2D}(\phi) = -2C_0 \cos\phi C_A^2 \int_{\theta_0}^{\theta_1} \frac{\theta_z \sin\theta_z}{(\cos\theta_z - C_B)^3} d\theta_z \quad (4.57)$$

식 (4.57)의 적분은 바이어슈트라스 치환을 이용하면 다음과 같이 구할 수 있다.

$$u_{2D}(\phi) = -2C_0 \cos\phi C_A^2 \left[\frac{\sin\theta_z}{2(C_B^2-1)(C_B-\cos\theta_z)} + \frac{2C_B \left(\frac{C_B-1}{C_B+1}\right)^{\frac{3}{2}} \tan^{-1}\left(\frac{\tan\left(\frac{\theta_z}{2}\right)}{\sqrt{\frac{C_B-1}{C_B+1}}}\right)}{2(C_B-1)^3} + \frac{\theta_z}{(C_B-\cos\theta_z)^2} \right]_{\theta_0}^{\theta_l}$$

(4.58)

앞에서 구한 U_{2A} , U_{2B} , U_{2C} , U_{2D} 의 적분 결과를 정리하면 노즐 벽면에서의 방사특성은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\begin{aligned}
 u_2(\phi) = & \\
 & -\frac{2K\sin\phi}{\tan\beta} \int_{\theta_0}^{\theta_l} \frac{\sin^2\theta_z}{\cos\theta_z - C_B} d\theta_z \\
 & -2C_0C_A^2 \frac{\sin\phi}{\tan\beta} \int_{\theta_0}^{\theta_l} \frac{\sin^2\theta_z}{(\cos\theta_z - C_B)^3} d\theta_z \\
 & -2K\cos\phi \int_{\theta_0}^{\theta_l} \frac{\theta_z \sin\theta_z}{\cos\theta_z - C_B} d\theta_z \\
 & -2C_0\cos\phi C_A^2 \int_{\theta_0}^{\theta_l} \frac{\theta_z \sin\theta_z}{(\cos\theta_z - C_B)^3} d\theta_z
 \end{aligned} \tag{4.59}$$

Where,

$$C_A = \frac{r_o}{2} \left(-\frac{\tan\beta}{\tan\phi} + \frac{\tan\phi}{\tan\beta} \right) \tag{4.33}$$

$$C_B = \frac{1}{2} \left(-\frac{\tan\beta}{\tan\phi} - \frac{\tan\phi}{\tan\beta} \right) \tag{4.34}$$

θ_1 과 θ_0 은 식 (4.40)과 식 (4.41)과 같다.

4.1.6 노즐 벽면 일부에서 노즐 출구로 방출되는 분자,

$$\tan\phi > (r_o + r_i) / l$$

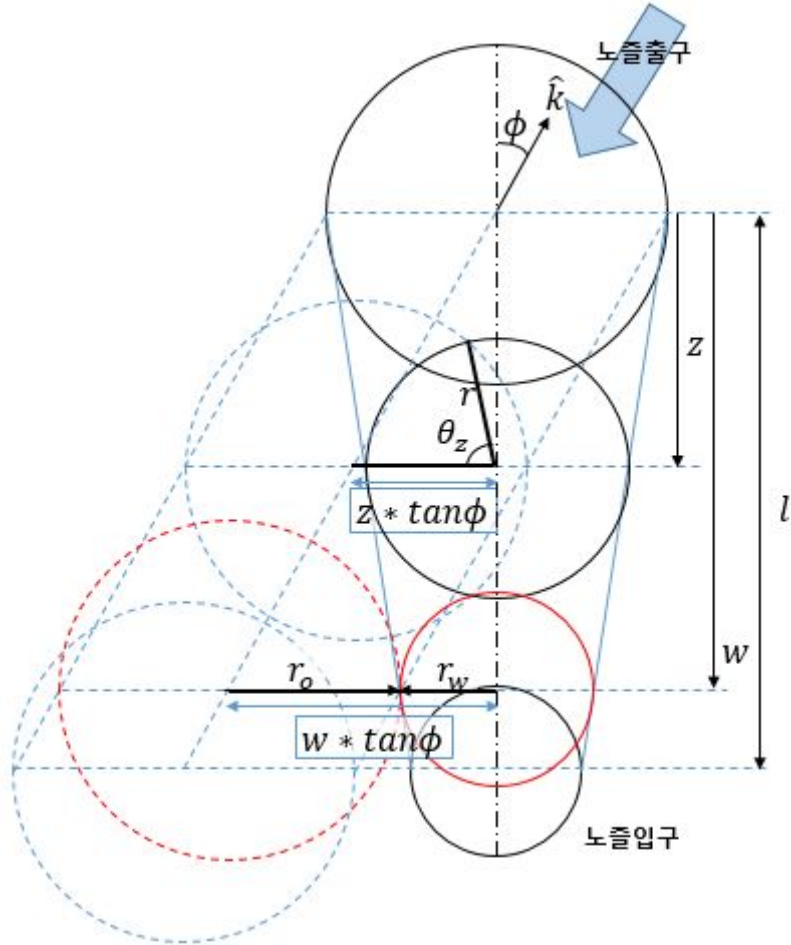


그림 4-8 노즐 벽면의 분자 방출 한계 위치 w

노즐의 방출 각도 ϕ 가 $\phi_{\text{critical B}}$ 보다 큰 경우 노즐 입구에서의 분자 방출은 사라지고 노즐 벽면에서의 방출만 존재하게 된다. 이때 분자를 방출할 수 있는 노즐 벽면의 영역은, $-k$ 방향에서 노즐 출구를 통해 노즐 내부를 바라봤을 때 보이는 노즐 벽면의 면적이 된다. 그림 4-8의 실선은 실제 원뿔형 노즐의 입구, 벽면, 출구의 경계를 나타내고

있다. 점선은 $-k$ 방향에서 노즐 출구를 통해 노즐 내부를 바라봤을 때 노즐 출구의 경계가 만드는 가상의 원통이다. 이 가상의 원통과 실제 노즐이 겹치는 부분이 k 방향으로 분자를 방출할 수 있는 영역이 된다.

그림 4-8 에서 노즐 출구에서 w 만큼 떨어진 위치를 보면 가상의 원통과 노즐 벽면이 한점에서 만나는 것을 볼 수 있다. 이 위치가 노즐 출구로 분자를 방출할 수 있는 한계가 된다. 이때 노즐 벽면에서의 방출되는 분자의 수를 계산하는 방법은 식(4.19)와 동일하고 적분 구간만 $0 \sim 1$ 에서 $0 \sim w$ 로 변경해주면 된다.

계산식은 다음과 같다.

$$u(\phi) = \int_0^w \int_{-\theta_z}^{\theta_z} \left(\frac{K}{r^2} + C_0 \right) (\cos\theta \sin\phi \cos\beta + \cos\phi \sin\beta) \frac{r}{\cos\beta} d\theta dz \quad (4.60)$$

$$u(\phi) = u_A(\phi) + u_B(\phi) + u_C(\phi) + u_D(\phi) \quad (4.61)$$

$$u_A(\phi) = \int_0^w \int_{-\theta_z}^{\theta_z} \left(\frac{K}{r^2} \right) (\cos\theta \sin\phi \cos\beta) \frac{r}{\cos\beta} d\theta dz \quad (4.62)$$

$$u_B(\phi) = \int_0^w \int_{-\theta_z}^{\theta_z} (C_0) (\cos\theta \sin\phi \cos\beta) \frac{r}{\cos\beta} d\theta dz \quad (4.63)$$

$$u_C(\phi) = \int_0^w \int_{-\theta_z}^{\theta_z} \left(\frac{K}{r^2}\right) (\cos\phi \sin\beta) \frac{r}{\cos\beta} d\theta dz \quad (4.64)$$

$$u_D(\phi) = \int_0^w \int_{-\theta_z}^{\theta_z} (C_0) (\cos\phi \sin\beta) \frac{r}{\cos\beta} d\theta dz \quad (4.65)$$

식(4.62)~(4.65) 를 적분하면 다음과 같다..

$$u_A(\phi) = -\frac{2K \sin\phi}{\tan\beta} \int_{\theta_0}^{\theta_w} \frac{\sin^2\theta_z}{\cos\theta_z - C_B} d\theta_z \quad (4.66)$$

$$u_B(\phi) = -2C_0 C_A^2 \frac{\sin\phi}{\tan\beta} \int_{\theta_0}^{\theta_w} \frac{\sin^2\theta_z}{(\cos\theta_z - C_B)^3} d\theta_z \quad (4.67)$$

$$u_C(\phi) = -2K \cos\phi \int_{\theta_0}^{\theta_w} \frac{\theta_z \sin\theta_z}{\cos\theta_z - C_B} d\theta_z \quad (4.68)$$

$$u_D(\phi) = -2C_0 \cos\phi C_A^2 \int_{\theta_0}^{\theta_w} \frac{\theta_z \sin\theta_z}{(\cos\theta_z - C_B)^3} d\theta_z \quad (4.69)$$

실직적으로 항상 $\theta_w = 0$ 이기 때문에 식 (4.66)~(4.69)의 적분은 4.1.5 보다 더 간단하게 계산할 수 있다.

앞에서 구한 U_A , U_B , U_C , U_D 의 적분 결과를 정리하면 노즐

벽면에서의 방사특성은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$u(\phi) =$$

$$\begin{aligned} & -\frac{2K\sin\phi}{\tan\beta} \int_{\theta_0}^{\theta_w} \frac{\sin^2\theta_z}{\cos\theta_z - C_B} d\theta_z \\ & -2C_0C_A^2 \frac{\sin\phi}{\tan\beta} \int_{\theta_0}^{\theta_w} \frac{\sin^2\theta_z}{(\cos\theta_z - C_B)^3} d\theta_z \\ & -2K\cos\phi \int_{\theta_0}^{\theta_w} \frac{\theta_z\sin\theta_z}{\cos\theta_z - C_B} d\theta_z \\ & -2C_0\cos\phi C_A^2 \int_{\theta_0}^{\theta_w} \frac{\theta_z\sin\theta_z}{(\cos\theta_z - C_B)^3} d\theta_z \end{aligned} \quad (4.70)$$

Where,

$$C_A = \frac{r_o}{2} \left(-\frac{\tan\beta}{\tan\phi} + \frac{\tan\phi}{\tan\beta} \right) \quad (4.33)$$

$$C_B = \frac{1}{2} \left(-\frac{\tan\beta}{\tan\phi} - \frac{\tan\phi}{\tan\beta} \right) \quad (4.34)$$

θ_0 은 식 (4.41)과 같다.

4.1.7 원뿔형 노즐의 방사특성

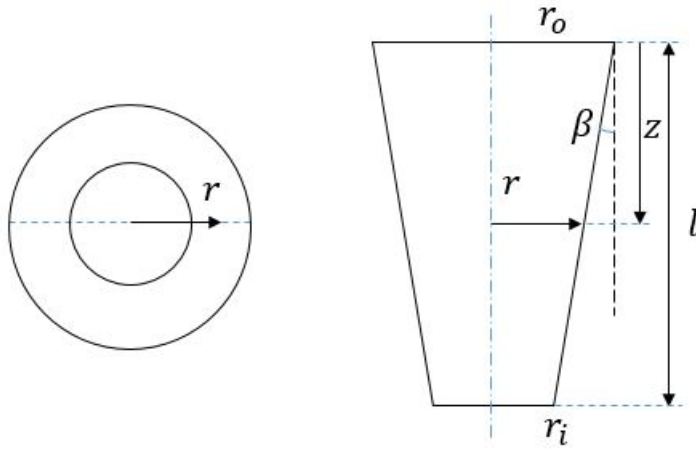


그림 4-9 원뿔형 노즐의 형상

앞에서 구한 노즐의 방사특성을 정리해보면 다음과 같다.

CASE I. $\tan \phi < (r_o - r_i) / l$:

$$\begin{aligned}
 u(\phi) = & c \pi r_i^2 \cos \phi \\
 & + 2\pi \left(-\frac{K}{\tan \alpha} \frac{\ln r_i}{\ln r_o} + C_o r_o l \right. \\
 & \left. - \frac{1}{2} C_o \tan \alpha l^2 \right) \cos \phi \tan \beta
 \end{aligned}
 \tag{4.71}$$

CASE II. $(r_o - r_i)/l < \tan\phi < (r_o + r_i)/l$:

$u(\phi) =$

$$\begin{aligned}
& c \cos\phi \left(\frac{1}{2} r_o^2 (2\theta_A - \sin 2\theta_A) + \frac{1}{2} r_i^2 (2\theta_B - \sin 2\theta_B) \right) \\
& - \frac{2K \sin\phi}{\tan\beta} \int_{\theta_0}^{\theta_l} \frac{\sin^2 \theta_z}{\cos\theta_z - C_B} d\theta_z \\
& - 2C_0 C_A^2 \frac{\sin\phi}{\tan\beta} \int_{\theta_0}^{\theta_l} \frac{\sin^2 \theta_z}{(\cos\theta_z - C_B)^3} d\theta_z \\
& - 2K \cos\phi \int_{\theta_0}^{\theta_l} \frac{\theta_z \sin\theta_z}{\cos\theta_z - C_B} d\theta_z \\
& - 2C_0 \cos\phi C_A^2 \int_{\theta_0}^{\theta_l} \frac{\theta_z \sin\theta_z}{(\cos\theta_z - C_B)^3} d\theta_z
\end{aligned}$$

(4.72)

Where,

$$C_A = \frac{r_o}{2} \left(-\frac{\tan\beta}{\tan\phi} + \frac{\tan\phi}{\tan\beta} \right) \quad (4.33)$$

$$C_B = \frac{1}{2} \left(-\frac{\tan\beta}{\tan\phi} - \frac{\tan\phi}{\tan\beta} \right) \quad (4.34)$$

CASE III. $\tan\phi > (r_o+r_i)/l$:

$u(\phi) =$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{2K\sin\phi}{\tan\beta} \int_{\theta_0}^{\theta_w} \frac{\sin^2\theta_z}{\cos\theta_z - C_B} d\theta_z \\
 & -2C_0C_A^2 \frac{\sin\phi}{\tan\beta} \int_{\theta_0}^{\theta_w} \frac{\sin^2\theta_z}{(\cos\theta_z - C_B)^3} d\theta_z \\
 & -2K\cos\phi \int_{\theta_0}^{\theta_w} \frac{\theta_z \sin\theta_z}{\cos\theta_z - C_B} d\theta_z \\
 & -2C_0\cos\phi C_A^2 \int_{\theta_0}^{\theta_w} \frac{\theta_z \sin\theta_z}{(\cos\theta_z - C_B)^3} d\theta_z
 \end{aligned}$$

(4.73)

Where,

$$C_A = \frac{r_o}{2} \left(-\frac{\tan\beta}{\tan\phi} + \frac{\tan\phi}{\tan\beta} \right) \quad (4.33)$$

$$C_B = \frac{1}{2} \left(-\frac{\tan\beta}{\tan\phi} - \frac{\tan\phi}{\tan\beta} \right) \quad (4.34)$$

4.2 원뿔형 노즐의 방사특성 결과

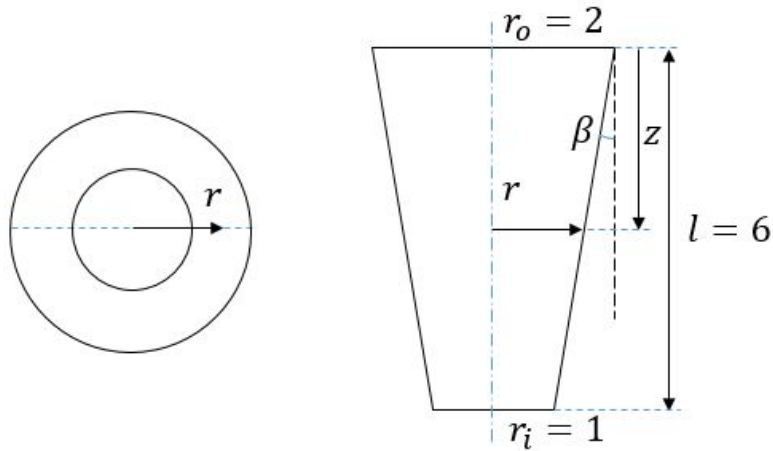


그림 4-10, 원뿔형 노즐 ($r_i=1, r_o=2, l=6$)

예를 들어 입구의 반지름이 1, 출구의 반지름이 2, 노즐의 길이가 6 인 노즐의 방사특성을 앞에서 계산한 식 (4.71), 식 (4.72), 식 (4.73)을 이용해서 구하는 과정은 다음과 같다.

노즐 입구 면의 압력에 해당하는 값 c 를 1 이라고 가정하면 노즐 내부 벽면 압력에 해당하는 식(4.7)에서 K, C_0 는 다음과 같이 계산할 수 있다.^[6]

R_{inlet}	1	1	1
R_{outlet}	2	4	6
H	6	6	6
$\Phi_{critical A}$	9.5°	26.6°	39.8°
$\Phi_{critical B}$	26.6°	39.8°	49.4°
C_0	-0.1584	-0.0171	-0.0055
K	0.8221	0.3826	0.2179

표 4-1. 노즐 길이에 따른 파라미터

이를 이용해서 원뿔형 노즐의 방사특성을 계산하면 다음과 같다.

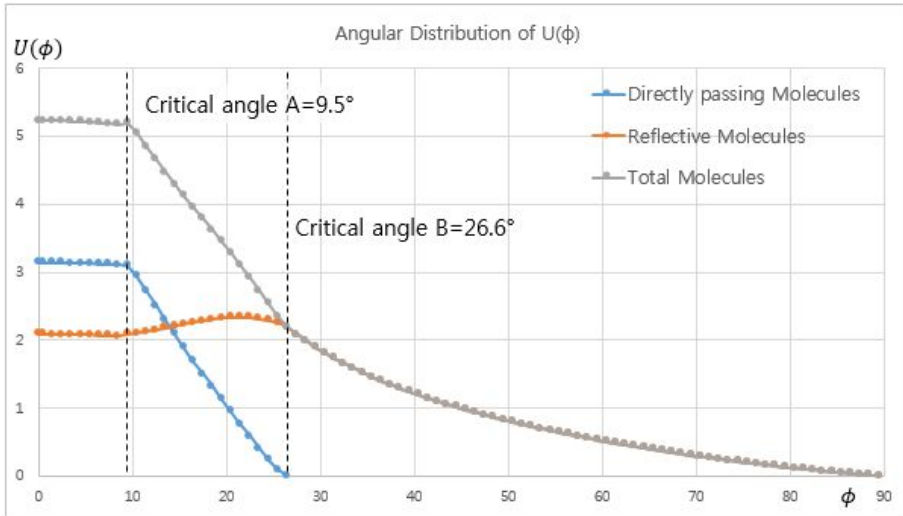


그림 4-11 원뿔형 노즐($r_i=1$, $r_o=2$, $l=6$)의 방사특성 결과

그림 4-11의 Directly passing Molecules 로 나타낸 부분은 노즐 입구에서 노즐 출구로 직접 방출되는 분자를 의미한다. 앞에서 설명한것처럼 Critical Angle A 까지는 노즐 출구를 통해 노즐 입구 면적 전체가 항상 보이기 때문에 방출각도의 증가에 따른 방사특성 변화량이 크지 않다. 하지만 Critical Angle A 를 넘는 각도에서는 노즐 출구를 통해 보이는 노즐 입구의 면적이 점점 감소하기 때문에 방출각도의 증가에 따른 방사특성 변화가 커진다. 그리고 방출각도가 Critical Angle B 에 도달하는 순간 입구에서 방출되는 분자는 사라진다.

그림 4-11 에서 Reflective Molecules 로 표시된 부분은 노즐의 벽면에서 방출되는 분자를 의미한다. 앞서 설명한 노즐 입구에서 방출되는 분자의 경우와 동일하게 방출각도(ϕ)가 Critical Angle A 보다 작을때는 노즐 출구를 통해 노즐 벽면 전체가 보이기 때문에 노즐 벽면 전체에서 분자를 방출할 수 있기 때문에 방출각도(ϕ) 증가에 따른

방사특성 변화량이 작다. 하지만 Critical Angle A 를 넘어서는 순간
노즐 입구의 경우처럼 분자를 방출할 수 있는 면적 자체가 감소하기
때문에 방출각도(ϕ) 증가에 따른 방사특성 변화량이 커진다.

표 4-1 을 이용하면 출구의 반경이 4, 6 인 경우에 대해서도 그림 4-
11 과 같이 방사특성을 구할 수 있다.

4.3 몬테카를로 시뮬레이션 결과

4.3.1 몬테카를로 시뮬레이션

동일한 노즐 형상에 대해 시뮬레이션 시간을 증가시켜가면서 시뮬레이션을 수행하였고, 표 3-2 와 동일한 조건으로 시뮬레이션을 수행하였다.

Item	R1L6R2	R1L6R2	R1L6R2	R1L6R2
Time Step(sec)	0.001	0.001	0.001	0.001
Iteration #	10000	40000	160000	640000
simulation time(sec)	10	40	160	640
inlet mesh #	144	144	144	144
nozzle bound mesh #	576	576	576	576
chamber mesh #	5764	5764	5764	5764
Execution Time(sec)	2723	11436	208660	182768
Execution Time(hr)	0.76	3.18	11.59	50.77
Outlet Particle #	2.38E+06	9.54E+06	3.82E+07	1.53E+08

표 4-2 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=2, l=6$) 시뮬레이션 조건

표 4-2 는 원뿔형 노즐의 입구 반지름이 1, 출구 반지름이 2, 노즐 전체의 길이가 6 인 노즐에 대한 시뮬레이션 시간에 따른 조건표이다. 동일한 노즐에 대해서 반복 계산(Iteration)를 각각 10000 회, 40000 회, 160000 회, 640000 회 수행하였고, 그에 따른 총 계산 시간은 0.76 시간, 3.18 시간, 11.59 시간, 50.57 시간이 소요되었다. 계산 횟수가 증가함에 따라 노즐 출구를 통과한 입자 수는 $2.38E+06$ 개에서 $1.53E+08$ 개로 시뮬레이션 시간에 거의 비례하게

증가하였다.

동일한 방법으로 노즐 방법으로 노즐 출구의 반지름이 4, 6 인 노즐에 대해서도 시뮬레이션을 수행하였다. 원통형 노즐의 시뮬레이션에서는 노즐의 길이를 증가시킬 수록 출구를 통과하는 입자의 수가 감소하는 경향을 보였지만, 원뿔형 노즐에서는 노즐 출구의 반지름을 증가시킬수록 출구를 통과하는 입자의 수가 증가하는 경향을 보였다. 이 차이는 노즐의 컨덕턴스 변화에 따른 차이로 원통형 노즐의 경우 노즐 길이가 증가하는 경우 컨덕턴스가 감소해서 노즐 출구를 통과하는 입자의 수가 감소하고, 원뿔형 노즐의 경우 노즐 출구의 반지름이 증가할수록 컨덕턴스가 증가하여 노즐 출구를 통과하는 입자의 수가 많아지는 것으로 생각할 수 있다. 이러한 현상을 이용하면 몬테카를로 시뮬레이션을 통해 노즐 형상에 따른 컨덕턴스도 구할 수 있다. 또 노즐 출구를 통과하는 입자의 방향을 카운팅하여 방사특성을 구하는 몬테카를로 시뮬레이션의 방법 때문에 노즐의 컨덕턴스가 감소하면 더 많은 시뮬레이션 시간이 필요하다는 점도 알 수 있다.

다음은 각각의 노즐에 대한 시뮬레이션 시간에 따른 시간에 따른 차이를 나타낸 표이다.

Item	R1L6R4	R1L6R4	R1L6R4	R1L6R4
Time Step(sec)	0.001	0.001	0.001	0.001
Iteration #	10000	40000	160000	640000
simulation time(sec)	10	40	160	640
inlet mesh #	154	154	154	154
nozzle bound mesh #	624	624	624	624
chamber mesh #	5678	5678	5678	5678
Execution Time(sec)	2505	9433	40281	154576
Execution Time(hr)	0.70	2.62	11.19	42.94
Outlet Particle #	3.55E+06	1.42E+07	5.68E+07	2.27E+08

표 4-3 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=4, l=6$) 시뮬레이션 조건

Item	R1H6R6	R1L6R6	R1L6R6	R1L6R6
Time Step(sec)	0.001	0.001	0.001	0.001
Iteration #	10000	40000	160000	640000
simulation time(sec)	10	40	160	640
inlet mesh #	144	144	144	144
nozzle bound mesh #	720	720	720	720
chamber mesh #	5674	5674	5674	5674
Execution Time(sec)	2476	9569	39643	144999
Execution Time(hr)	0.69	2.66	11.01	40.28
Outlet Particle #	3.88E+06	1.55E+07	6.21E+07	2.49E+08

표 4-4 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=6, l=6$) 시뮬레이션 조건

4.3.2 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=2, l=6$)의 방사특성

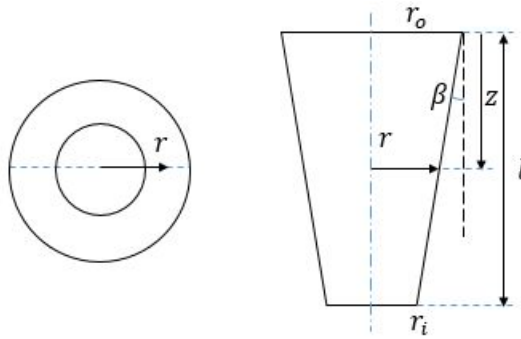


그림 4-12 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=2, l=6$)

다음은 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=2, l=6$)에 대한 몬테카를로 시뮬레이션 결과이다.

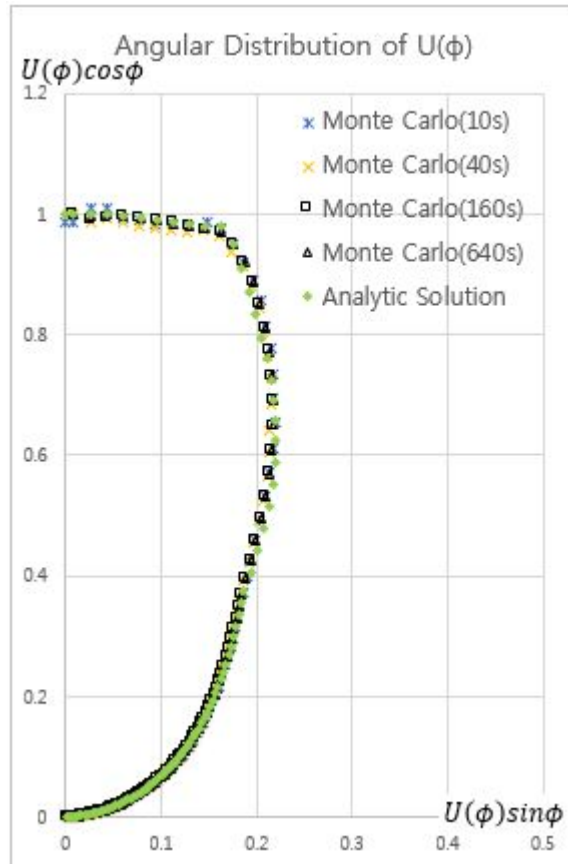


그림 4-13 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=2, l=6$)의 방사특성

몬테카를로 시뮬레이션에서 시뮬레이션 시간이 증가함에 따라 앞에서

계산한 해석적 해에 점점 수렴해가는 것을 볼 수 있다.

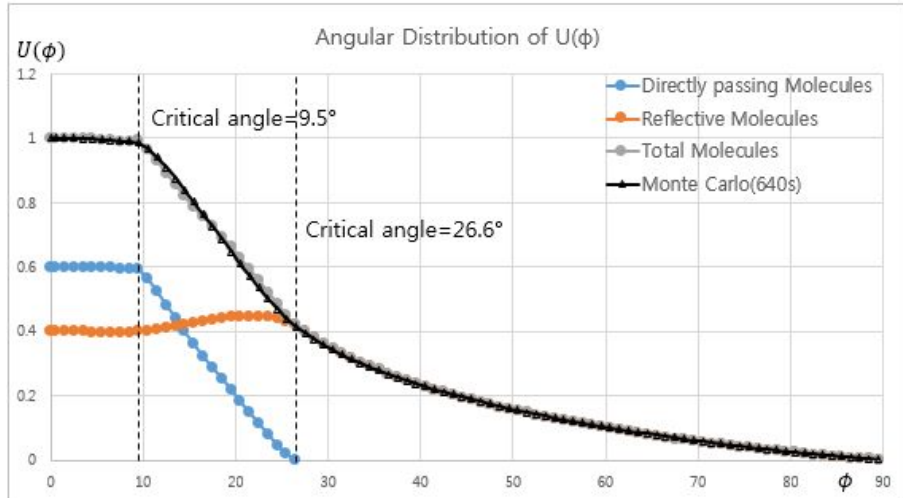


그림 4-14 원뿔형 노즐($r_i=1$, $r_o=2$, $l=6$)의 방사특성

그림 4-14 는 본 논문에서 구한 노즐의 방사특성에 대한 해석적 해와 몬테카를로 시뮬레이션으로 구한 노즐의 방사특성의 값을 같이 나타낸 그래프이다. 두 그래프가 거의 일치하는 것을 확인할 수 있다.

simulation time		10s	40s	160s	640s
R1L6R2	RMSE	7.80E-03	7.21E-03	6.95E-03	6.89E-03
	Particle#	2.38E+06	9.54E+06	3.82E+07	1.53E+08

표 4-5 원뿔형 노즐($r_i=1$, $r_o=2$, $l=6$)의 해석적 해에 대한 RMSE

이 두 그래프의 차이값은 시뮬레이션 시간 640s 기준으로 전체 구간에서 RMSE 가 $6.89E-03$ 이다. 이 값은 평균 방사특성값 0.335495 의 2.05%에 해당한다.

ϕ [deg]	Analytic Solution			Monte Carlo Simulation			
	Directly passing Molecules	Reflective Molecules	Total Molecules	Monte Carlo(640s)	Monte Carlo(160s)	Monte Carlo(40s)	Monte Carlo(10s)
0.5	0.600790929	0.399209071	1	1.0015	1.003	1.011	0.986
1.5	0.600607922	0.399087468	0.99969539	0.99942614	0.994169421	0.997013894	1.008208536
2.5	0.600241964	0.398844299	0.999086264	1.000794746	0.99790241	1.00516782	1.008836066
3.5	0.599693167	0.398479639	0.998172806	0.998422477	0.999816017	0.99995181	0.995732287
4.5	0.598961697	0.397993597	0.996955295	0.997797928	0.99749998	0.993915951	0.991666261
5.5	0.598047778	0.397386323	0.995434101	0.996177332	0.996503617	0.991095497	0.985949439
6.5	0.596951688	0.396658001	0.993609689	0.992226935	0.994096075	0.991377308	0.988819843
7.5	0.59567376	0.395808854	0.991482614	0.991154507	0.991345001	0.987945825	0.988548083
8.5	0.594214385	0.394839139	0.989053523	0.990137249	0.987892205	0.993083211	0.997645792
9.5	0.592348107	0.400435845	0.992783952	0.985271657	0.984774252	0.986714489	0.989720503
10.5	0.56289875	0.401924837	0.964823587	0.967534316	0.96812602	0.964225465	0.964184134
11.5	0.522269711	0.406029156	0.928298867	0.941663801	0.94109912	0.941009114	0.937741335
12.5	0.480105367	0.411119817	0.891225184	0.909814251	0.910501281	0.912744383	0.912555375
13.5	0.438850688	0.416629909	0.855480598	0.875088904	0.875848156	0.87626584	0.881259749
14.5	0.399140465	0.422221012	0.821361477	0.839423567	0.840586763	0.838656195	0.839092627
15.5	0.360941875	0.42765184	0.788593715	0.802117145	0.803809938	0.802939619	0.806191377
16.5	0.32396706	0.432729289	0.756696349	0.762559886	0.763994217	0.765403696	0.766045602
17.5	0.28785319	0.437284106	0.725137296	0.725176698	0.725372044	0.724055081	0.726088185
18.5	0.25225356	0.441156025	0.693409584	0.685831326	0.68559999	0.68319048	0.690143496
19.5	0.216893396	0.444182619	0.661076016	0.64721376	0.647144557	0.647664838	0.648822674
20.5	0.181614816	0.446188808	0.627803624	0.608794188	0.609869374	0.608964002	0.609057155
21.5	0.146425723	0.446974448	0.593400172	0.571729792	0.572125418	0.570720269	0.570403833
22.5	0.111567066	0.446296466	0.557863532	0.53543144	0.536119099	0.536038522	0.53266187
23.5	0.077622272	0.443838224	0.521460497	0.501434481	0.501432912	0.49995768	0.49965398
24.5	0.045726757	0.439146729	0.484873485	0.468484769	0.468895014	0.469404564	0.466343931
25.5	0.018079749	0.431466521	0.449546271	0.438825011	0.439494557	0.439534933	0.440787939
26.5	0.000291864	0.418961224	0.419253089	0.413771479	0.4137188	0.413270726	0.415554173
27.5	0	0.398931414	0.398931414	0.393454114	0.394297	0.394677725	0.395734741
28.5	0	0.380160326	0.380160326	0.375269345	0.37590638	0.376723677	0.376800711
29.5	0	0.362773885	0.362773885	0.358225699	0.359056164	0.358989139	0.360600537
30.5	0	0.34660078	0.34660078	0.342475496	0.342880379	0.344589604	0.34452081
31.5	0	0.331497283	0.331497283	0.327532496	0.328562986	0.32914573	0.330665779
32.5	0	0.317341906	0.317341906	0.313976233	0.314483685	0.314298742	0.313652812
33.5	0	0.304031265	0.304031265	0.301236118	0.300819643	0.300282923	0.301171395
34.5	0	0.291476832	0.291476832	0.288834648	0.288787715	0.288324317	0.286610934
35.5	0	0.279602371	0.279602371	0.277575663	0.277994921	0.277464718	0.276125177
36.5	0	0.26834189	0.26834189	0.266751864	0.267173232	0.267828233	0.268847995
37.5	0	0.257637987	0.257637987	0.256360238	0.256818546	0.256807368	0.255869807
38.5	0	0.247440516	0.247440516	0.246513633	0.246520792	0.24735715	0.245206253
39.5	0	0.237705483	0.237705483	0.237218692	0.237521599	0.236612017	0.237348356
40.5	0	0.228394152	0.228394152	0.228088719	0.228147805	0.227518825	0.227122079
41.5	0	0.219472291	0.219472291	0.219398563	0.219753334	0.21955713	0.219813608
42.5	0	0.210909554	0.210909554	0.211414789	0.211386722	0.211634021	0.212595364
43.5	0	0.202678957	0.202678957	0.203002975	0.202945628	0.203140899	0.202137369
44.5	0	0.194756437	0.194756437	0.195462386	0.195587027	0.195456604	0.197241728
45.5	0	0.187120481	0.187120481	0.188352389	0.188605664	0.188185463	0.187731482
46.5	0	0.17975181	0.17975181	0.181033508	0.18136753	0.181286255	0.183461509
47.5	0	0.172633105	0.172633105	0.173818336	0.173924814	0.173510084	0.174191105
48.5	0	0.165748782	0.165748782	0.167311396	0.167423854	0.167920993	0.168276142
49.5	0	0.159084783	0.159084783	0.160731348	0.160973081	0.160963084	0.160644103
50.5	0	0.152628411	0.152628411	0.154544251	0.154950567	0.154785443	0.156052943
51.5	0	0.146368176	0.146368176	0.14832805	0.148398508	0.148608183	0.148697252
52.5	0	0.140293666	0.140293666	0.142396949	0.142784202	0.14245721	0.142225994
53.5	0	0.134395432	0.134395432	0.136904064	0.136974824	0.136982344	0.136752018
54.5	0	0.12866489	0.12866489	0.131047005	0.130993172	0.131162187	0.130815855
55.5	0	0.123094234	0.123094234	0.125631965	0.125750349	0.125398258	0.126784499
56.5	0	0.117676355	0.117676355	0.120397457	0.120374304	0.120479148	0.120018967
57.5	0	0.112404776	0.112404776	0.115007128	0.114932686	0.11461863	0.11423123

58.5	0	0.107273592	0.107273592	0.109875886	0.110043654	0.1094052	0.108450501
59.5	0	0.102277414	0.102277414	0.104930284	0.104923688	0.105192387	0.104592894
60.5	0	0.097411325	0.097411325	0.10010555	0.100311111	0.100531657	0.100728005
61.5	0	0.092670833	0.092670833	0.09552471	0.095643647	0.095428836	0.095443812
62.5	0	0.088051839	0.088051839	0.090777354	0.090955191	0.090862815	0.090829753
63.5	0	0.083550595	0.083550595	0.086423253	0.086450483	0.086771052	0.087006172
64.5	0	0.079163682	0.079163682	0.082093906	0.082462345	0.082387514	0.082539362
65.5	0	0.074887977	0.074887977	0.077647135	0.077427933	0.077078097	0.077965491
66.5	0	0.070720631	0.070720631	0.073461937	0.073576827	0.073353442	0.073232165
67.5	0	0.066659046	0.066659046	0.069400007	0.06948272	0.069235416	0.069794452
68.5	0	0.062700854	0.062700854	0.065398692	0.065524381	0.065294548	0.065174031
69.5	0	0.058843902	0.058843902	0.061516103	0.061401926	0.061440876	0.061704058
70.5	0	0.055086231	0.055086231	0.057676287	0.057714574	0.057791073	0.057679298
71.5	0	0.051426065	0.051426065	0.054028217	0.05407487	0.054039984	0.054268898
72.5	0	0.047861796	0.047861796	0.050291543	0.050207409	0.050017845	0.050338957
73.5	0	0.044391972	0.044391972	0.046792312	0.046920146	0.04679646	0.046897789
74.5	0	0.041015286	0.041015286	0.043283544	0.043249945	0.043538576	0.044676471
75.5	0	0.037730566	0.037730566	0.039930096	0.039967988	0.040003628	0.040551739
76.5	0	0.034536763	0.034536763	0.036637874	0.036623539	0.036452467	0.036817729
77.5	0	0.031432948	0.031432948	0.033322447	0.033213061	0.033038892	0.032842739
78.5	0	0.028418301	0.028418301	0.030250231	0.030221552	0.030249515	0.03072789
79.5	0	0.025492103	0.025492103	0.027182952	0.027267415	0.027391778	0.027291378
80.5	0	0.022653732	0.022653732	0.024216324	0.024246859	0.024422857	0.024730968
81.5	0	0.019902657	0.019902657	0.021369363	0.021412189	0.02124223	0.021052786
82.5	0	0.017238432	0.017238432	0.01851104	0.018514089	0.018690288	0.018610512
83.5	0	0.01466069	0.01466069	0.015843003	0.015825047	0.015734265	0.015889574
84.5	0	0.012169143	0.012169143	0.01318224	0.013119191	0.013221858	0.01332962
85.5	0	0.009763573	0.009763573	0.010572298	0.01055434	0.010410599	0.010517661
86.5	0	0.007443831	0.007443831	0.008085916	0.008101428	0.008175635	0.00833348
87.5	0	0.005209835	0.005209835	0.005703432	0.005647171	0.005497923	0.005745967
88.5	0	0.003061564	0.003061564	0.003380494	0.003364761	0.003369253	0.003465061
89.5	0	0.000999061	0.000999061	0.001107172	0.001094231	0.001122388	0.001221339

표 4-6 원뿔형 노즐($r_i=1$, $r_o=2$, $l=6$)의 방사특성 데이터

4.3.3 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=4, l=6$)의 방사특성

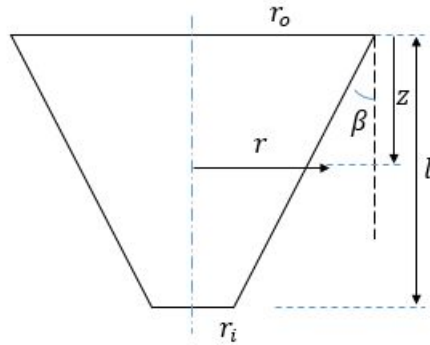


그림 4-15 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=4, l=6$)

다음은 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=4, l=6$)에 대한 몬테카를로 시뮬레이션 결과이다.

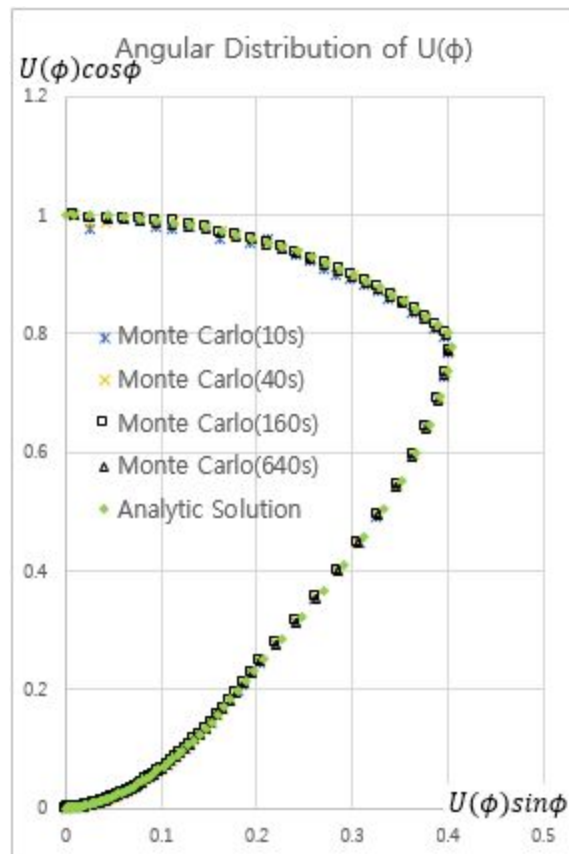


그림 4-16 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=4, l=6$)의 방사특성

몬테카를로 시뮬레이션에서 시뮬레이션 시간이 증가함에 따라 앞에서 계산한 해석적 해에 점점 수렴해가는 것을 볼 수 있다.

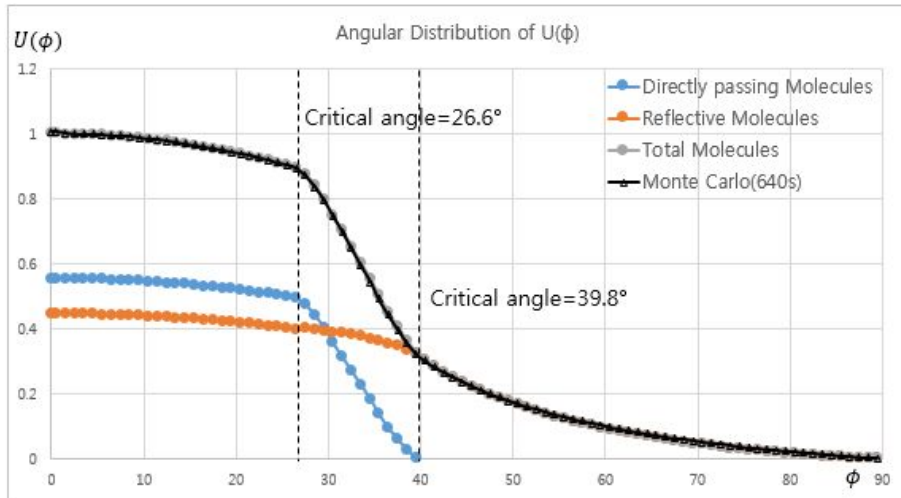


그림 4-17 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=4, l=6$)의 방사특성

그림 4-17 는 본 논문에서 구한 노즐의 방사특성에 대한 해석적 해와 몬테카를로 시뮬레이션으로 구한 노즐의 방사특성의 값을 같이 나타낸 그래프이다. 두 그래프가 거의 일치하는 것을 확인할 수 있다.

simulation time		10s	40s	160s	640s
R1L6R4	RMSE	5.65E-03	4.99E-03	4.81E-03	4.79E-03
	Particle#	3.55E+06	1.42E+07	5.68E+07	2.27E+08

표 4-7 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=4, l=6$)의 해석적 해에 대한 RMSE

이 두 그래프의 차이값은 시뮬레이션 시간 640s 기준으로 전체 구간에서 RMSE 가 4.79E-03 이다. 이 값은 평균 방사특성값 0.4295849 의 1.11%에 해당한다.

φ[deg]	Analytic Solution			Monte Carlo Simulation			
	Density passing Molecules	Reflective Molecules	Total Molecules	Monte Carlo(640s)	Monte Carlo(160s)	Monte Carlo(40s)	Monte Carlo(10s)
0.5	0.554233989	0.445766011	1	1.005	1.003	1.004	1.007
1.5	0.554065164	0.445630226	0.99969539	1.000171481	0.99742099	0.990820181	0.982152536
2.5	0.553727566	0.445358698	0.999086264	0.999615174	0.998113283	0.992361106	0.999237603
3.5	0.553221296	0.44495151	0.998172806	0.998158398	0.998603326	0.998836644	1.001848284
4.5	0.55254651	0.444408785	0.996955295	0.998165083	1.000212876	1.001912028	1.000496578
5.5	0.551703413	0.443730688	0.995434101	0.996744049	0.99756527	0.997141688	0.990010691
6.5	0.550692262	0.442917427	0.993609689	0.994688845	0.997240676	0.99857406	0.988905966
7.5	0.549513365	0.441969249	0.991482614	0.992810722	0.99363803	0.999514499	0.995546891
8.5	0.54816708	0.440886444	0.989053523	0.991672437	0.991768321	0.993102492	0.997990349
9.5	0.546653818	0.439669339	0.986323158	0.987504695	0.987095536	0.989091739	0.980148902
10.5	0.544974041	0.438318307	0.983292348	0.984815695	0.985734619	0.987180993	0.989082458
11.5	0.543128259	0.43683376	0.979962019	0.982042699	0.983292506	0.981148335	0.97876556
12.5	0.541117035	0.435216148	0.976333183	0.9773758	0.978288219	0.980629406	0.989145321
13.5	0.538940981	0.433465965	0.972406947	0.974422373	0.975210623	0.976523805	0.97453401
14.5	0.536600761	0.431583745	0.968184506	0.969982124	0.96943847	0.970983391	0.971052023
15.5	0.534097087	0.42957006	0.963667147	0.964592771	0.964461474	0.964738556	0.962872816
16.5	0.531430722	0.427425523	0.958856245	0.959599821	0.960770573	0.96069256	0.955167123
17.5	0.528602478	0.425150789	0.953753267	0.954981604	0.955245427	0.953194655	0.949985436
18.5	0.525613216	0.422746549	0.948359766	0.949362162	0.950051537	0.951906868	0.946299493
19.5	0.522463848	0.420213537	0.942677385	0.94375506	0.945442614	0.946281157	0.941390242
20.5	0.519155332	0.417552524	0.936707856	0.937893542	0.938803484	0.937104525	0.93848861
21.5	0.515688676	0.41476432	0.930452997	0.931679586	0.932522677	0.933003542	0.928414743
22.5	0.512064937	0.411849776	0.923914712	0.924689356	0.92539797	0.927795298	0.930319712
23.5	0.508285217	0.408809777	0.917094995	0.918602166	0.920267006	0.919661643	0.916524835
24.5	0.504350669	0.405645251	0.909995921	0.910987017	0.911714347	0.914075994	0.913782142
25.5	0.500262491	0.402357162	0.902619653	0.902423191	0.904128369	0.902678082	0.900710834
26.5	0.496021928	0.398946511	0.894968439	0.894892158	0.896039132	0.89749733	0.895146571
27.5	0.475689306	0.400720702	0.876410008	0.870992493	0.872043781	0.872843229	0.871080935
28.5	0.44226447	0.397264795	0.839529265	0.834890584	0.835791963	0.835752494	0.83378562
29.5	0.403127935	0.393729133	0.796857068	0.79328067	0.794147639	0.796469532	0.79735215
30.5	0.360816999	0.389955095	0.750772094	0.746972612	0.746903404	0.749706341	0.74891047
31.5	0.316751121	0.385826713	0.702577834	0.697709339	0.698452124	0.699789245	0.699249745
32.5	0.271861468	0.381237645	0.653099114	0.646671513	0.648221006	0.649315498	0.647328075
33.5	0.226849645	0.376077824	0.602927469	0.594172866	0.594524371	0.595450256	0.593797448
34.5	0.182338302	0.370223332	0.552561635	0.542746356	0.542567445	0.543867558	0.546501238
35.5	0.138990782	0.363524408	0.50251519	0.491777583	0.492410448	0.49337249	0.492463629
36.5	0.097642997	0.355786562	0.453429558	0.442261426	0.442460484	0.443334376	0.439562292
37.5	0.059503984	0.346733981	0.406237965	0.396319074	0.396531871	0.397580449	0.397235882
38.5	0.026579044	0.335920127	0.362499171	0.354926766	0.354938364	0.355579157	0.354409688
39.5	0.003161403	0.322396158	0.32555756	0.321629099	0.322036784	0.3221684	0.320525155
40.5	0	0.303311328	0.303311328	0.300288607	0.300677822	0.30065663	0.300197056
41.5	0	0.284468921	0.284468921	0.282028467	0.282326811	0.282471482	0.280625289
42.5	0	0.267170219	0.267170219	0.265275243	0.265631881	0.265539744	0.267330336
43.5	0	0.251212933	0.251212933	0.249617211	0.250026035	0.250246618	0.24995927
44.5	0	0.236431106	0.236431106	0.235504061	0.235533643	0.236145292	0.234233437
45.5	0	0.222687092	0.222687092	0.222568917	0.222731057	0.223032522	0.222877068
46.5	0	0.209865613	0.209865613	0.210359859	0.210988733	0.211002633	0.211188716
47.5	0	0.197869282	0.197869282	0.198747593	0.199118727	0.198886046	0.199419426
48.5	0	0.186615191	0.186615191	0.188168143	0.188178874	0.188122027	0.18998642
49.5	0	0.176032258	0.176032258	0.177982999	0.178201086	0.178497878	0.17909211
50.5	0	0.166059154	0.166059154	0.168837619	0.169163295	0.169567974	0.169884304
51.5	0	0.15664266	0.15664266	0.159812735	0.159980169	0.160046318	0.160998735
52.5	0	0.147736349	0.147736349	0.151509591	0.151719379	0.151498916	0.151098593
53.5	0	0.139299522	0.139299522	0.143721473	0.143681181	0.143904048	0.143938107
54.5	0	0.131296345	0.131296345	0.13589234	0.13641214	0.136837274	0.136403055
55.5	0	0.123695135	0.123695135	0.128799915	0.129078018	0.12901577	0.130541725
56.5	0	0.116467774	0.116467774	0.121965693	0.122265197	0.122241843	0.121697679
57.5	0	0.109589217	0.109589217	0.115212056	0.115290729	0.115026597	0.114984211

58.5	0	0.103037089	0.103037089	0.109334436	0.109607081	0.109956239	0.109329119
59.5	0	0.096791332	0.096791332	0.102956305	0.103208154	0.103445269	0.103386411
60.5	0	0.09083392	0.09083392	0.097506824	0.097588552	0.097293813	0.09671514
61.5	0	0.085148604	0.085148604	0.091870141	0.09206377	0.092077685	0.091053492
62.5	0	0.079720707	0.079720707	0.086661757	0.086737238	0.086333645	0.085812216
63.5	0	0.074536934	0.074536934	0.081606781	0.08167685	0.081777352	0.081316143
64.5	0	0.069585221	0.069585221	0.076609539	0.076673439	0.07652468	0.076605909
65.5	0	0.064854594	0.064854594	0.072224101	0.072268774	0.071907095	0.072177112
66.5	0	0.060335055	0.060335055	0.067608	0.067637562	0.067401214	0.06751593
67.5	0	0.056017476	0.056017476	0.063323072	0.063481498	0.063597369	0.063339056
68.5	0	0.05189351	0.05189351	0.059216107	0.059243158	0.059302118	0.059026938
69.5	0	0.047955512	0.047955512	0.055220518	0.05544411	0.055518435	0.055781102
70.5	0	0.044196467	0.044196467	0.05128095	0.051425953	0.051413089	0.051108974
71.5	0	0.040609933	0.040609933	0.04767249	0.047822466	0.048072914	0.047759276
72.5	0	0.037189982	0.037189982	0.044129276	0.044225046	0.044323985	0.044077486
73.5	0	0.033931156	0.033931156	0.040706131	0.040628623	0.041065676	0.040734871
74.5	0	0.03082842	0.03082842	0.037356718	0.037294718	0.037169342	0.037637852
75.5	0	0.027877126	0.027877126	0.034220368	0.034236158	0.03425754	0.033620685
76.5	0	0.02507298	0.02507298	0.031143316	0.031051974	0.031227189	0.031487852
77.5	0	0.022412009	0.022412009	0.028175846	0.028126	0.02839913	0.028204674
78.5	0	0.019890535	0.019890535	0.025308186	0.025371892	0.025274678	0.025138951
79.5	0	0.017505149	0.017505149	0.022603497	0.022592492	0.022614289	0.022468481
80.5	0	0.015252692	0.015252692	0.020043945	0.020033787	0.020082189	0.020460454
81.5	0	0.013130232	0.013130232	0.017483589	0.017388495	0.017566977	0.017509454
82.5	0	0.011135046	0.011135046	0.015097988	0.014973918	0.014951654	0.014953866
83.5	0	0.009264607	0.009264607	0.012778389	0.012798976	0.012888106	0.012823898
84.5	0	0.007516565	0.007516565	0.010547607	0.010572673	0.010557241	0.010266247
85.5	0	0.005888738	0.005888738	0.008394857	0.008399501	0.008427011	0.008320507
86.5	0	0.004379096	0.004379096	0.006401233	0.006451219	0.006450408	0.006719596
87.5	0	0.002985753	0.002985753	0.004440956	0.004453972	0.004424106	0.004176824
88.5	0	0.001706955	0.001706955	0.002590481	0.002589819	0.002591321	0.002715042
89.5	0	0.000541074	0.000541074	0.000858364	0.000893503	0.000914766	0.000891702

표 4-8 원뿔형 노즐($r_i=1$, $r_o=4$, $l=6$)의 방사특성 데이터

4.3.4 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=6, l=6$)의 방사특성

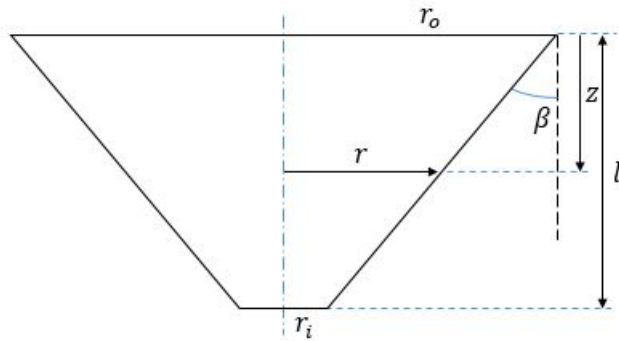


그림 4-18 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=6, l=6$)

다음은 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=6, l=6$)에 대한 몬테카를로 시뮬레이션 결과이다.

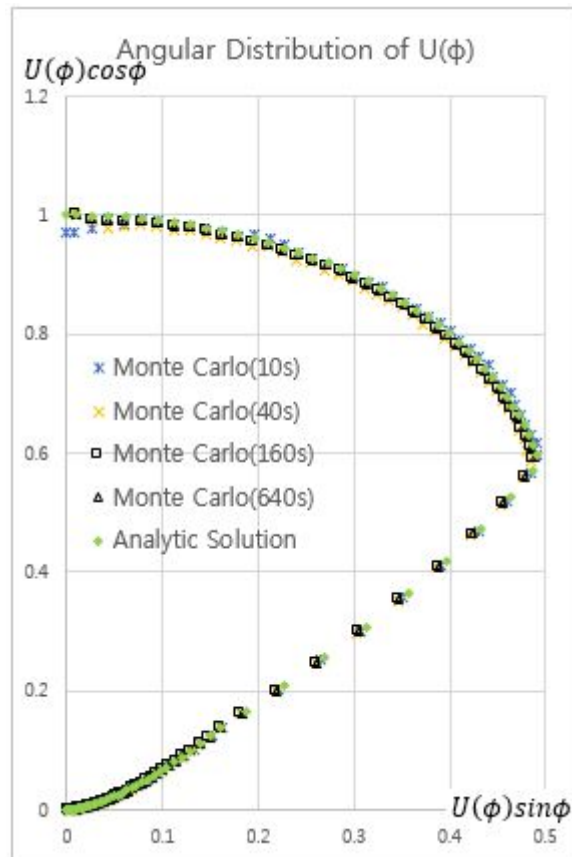


그림 4-19 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=6, l=6$)의 방사특성

몬테카를로 시뮬레이션에서 시뮬레이션 시간이 증가함에 따라 앞에서

계산한 해석적 해에 점점 수렴해가는 것을 볼 수 있다.

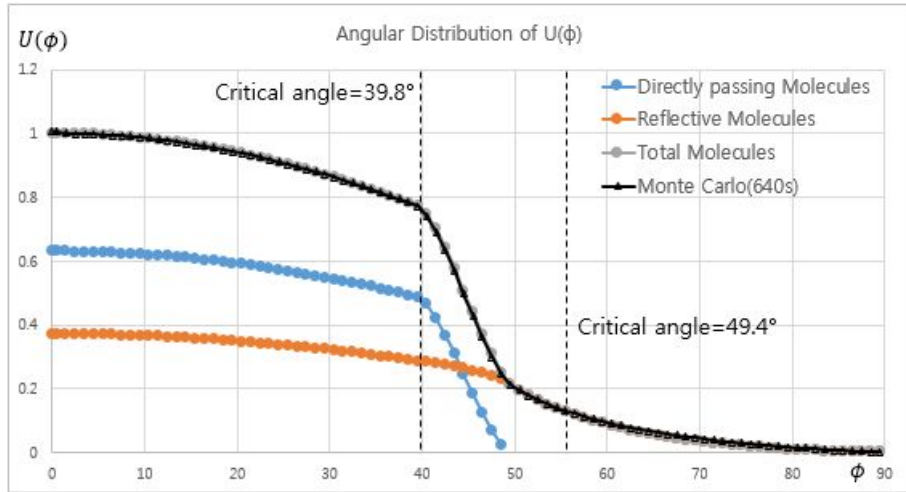


그림 4-20 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=6, l=6$)의 방사특성

그림 4-20 은 본 논문에서 구한 노즐의 방사특성에 대한 해석적 해와 몬테카를로 시뮬레이션으로 구한 노즐의 방사특성의 값을 같이 나타낸 그래프이다. 두 그래프가 거의 일치하는 것을 확인할 수 있다.

simulation time		10s	40s	160s	640s
R1L6R6	RMSE	6.78E-03	5.44E-03	5.32E-03	5.27E-03
	Particle#	3.88E+06	1.55E+07	6.21E+07	2.49E+08

표 4-9 원뿔형 노즐($r_i=1, r_o=6, l=6$)의 해석적 해에 대한 RMSE

이 두 그래프의 차이값은 시뮬레이션 시간 640s 기준으로 전체 구간에서 RMSE 가 $5.27E-03$ 이다. 이 값은 평균 방사특성값 0.4881953 의 1.08%에 해당한다.

ϕ [deg]	Analytic Solution			Monte Carlo Simulation			
	Directly passing Molecules	Reflective Molecules	Total Molecules	Monte Carlo(640s)	Monte Carlo(160s)	Monte Carlo(40s)	Monte Carlo(10s)
0.5	0.629584768	0.370415232	1	1.005	1.007	1.012	0.97
1.5	0.62939299	0.3703024	0.99969539	0.999967191	0.998906717	1.002900296	0.97821648
2.5	0.629005493	0.370076771	0.999086264	0.99837748	0.996508027	0.990977919	0.996278353
3.5	0.628434394	0.369738412	0.998172806	0.998679446	0.997935129	0.996145317	0.986617861
4.5	0.627667868	0.369287427	0.996955295	0.997605655	0.998630738	0.999958433	0.9976189
5.5	0.626710147	0.368723954	0.995434101	0.995970353	0.997119055	0.996526119	0.995913763
6.5	0.625561525	0.368048164	0.993609689	0.992558144	0.993748004	0.993681916	0.989200811
7.5	0.624222351	0.367260263	0.991482614	0.993100708	0.993009547	0.993557554	0.989484805
8.5	0.622693033	0.366360491	0.989053523	0.991551941	0.991528659	0.991576502	0.985835116
9.5	0.620974036	0.365349122	0.986323158	0.986935306	0.985781648	0.987461663	0.985363614
10.5	0.619065885	0.364226464	0.983292348	0.985235108	0.984833064	0.984536043	0.98175474
11.5	0.61696916	0.362992859	0.979962019	0.981094291	0.980445633	0.979971621	0.985635655
12.5	0.6146845	0.361648683	0.976333183	0.977755607	0.978383962	0.980329538	0.985477554
13.5	0.612212602	0.360194345	0.972406947	0.973607948	0.97395453	0.975231881	0.977105809
14.5	0.609554217	0.358630289	0.968184506	0.968143946	0.966956058	0.966468207	0.967335001
15.5	0.606710157	0.35695699	0.963667147	0.964021577	0.965448589	0.965836752	0.961577329
16.5	0.603681286	0.355174959	0.958856245	0.959672479	0.959026197	0.958495325	0.957478579
17.5	0.600468529	0.353284738	0.953753267	0.954302869	0.956095665	0.954264159	0.955937073
18.5	0.597072863	0.351286903	0.948359766	0.948530377	0.948909622	0.949505635	0.947340801
19.5	0.593495323	0.349182063	0.942677385	0.942714022	0.941991308	0.940985234	0.941688243
20.5	0.589736998	0.346970858	0.936707856	0.937522777	0.937872895	0.937302834	0.939633951
21.5	0.585799034	0.344653963	0.930452997	0.931608408	0.931306096	0.930887126	0.926295104
22.5	0.581682629	0.342232083	0.923914712	0.924296803	0.924651967	0.926875591	0.923254832
23.5	0.577389039	0.339705956	0.917094995	0.917623484	0.918314659	0.917501367	0.918665246
24.5	0.57291957	0.33707635	0.909995921	0.910677455	0.911304009	0.90875441	0.912040738
25.5	0.568275585	0.334344069	0.902619653	0.902683923	0.903089812	0.902100128	0.906697037
26.5	0.563458497	0.331509942	0.894968439	0.895892778	0.896723462	0.895554254	0.899179275
27.5	0.558469774	0.328574835	0.887044609	0.887447248	0.886531195	0.889800972	0.888388704
28.5	0.553310936	0.325539641	0.878850577	0.879843124	0.880409421	0.882003886	0.883421931
29.5	0.547983554	0.322405284	0.870388838	0.871062467	0.871093621	0.873242901	0.875357163
30.5	0.542489251	0.319172719	0.86166197	0.862805153	0.862723438	0.863028414	0.86738834
31.5	0.536829701	0.315842931	0.852672632	0.852959437	0.853938326	0.854281117	0.853381818
32.5	0.531006627	0.312416934	0.843423561	0.844395895	0.844849608	0.845424069	0.847490016
33.5	0.525021803	0.308895772	0.833917575	0.834316689	0.834870366	0.834499247	0.838987398
34.5	0.518877052	0.305280518	0.82415757	0.824328182	0.825266652	0.826683667	0.826574802
35.5	0.512574247	0.301572272	0.814146519	0.81485481	0.816478961	0.817586556	0.817096341
36.5	0.506115306	0.297772164	0.80388747	0.804093829	0.803795625	0.803777941	0.804748568
37.5	0.499502198	0.293881352	0.79338355	0.794147504	0.794344484	0.794001612	0.795791145
38.5	0.492736936	0.289901021	0.782637957	0.78314771	0.783904878	0.782164844	0.787881714
39.5	0.485821583	0.285832383	0.771653966	0.771509713	0.771230314	0.771528216	0.772090322
40.5	0.464646872	0.285377991	0.750024863	0.741722592	0.742254882	0.743631161	0.746768075
41.5	0.420312489	0.28034419	0.70065668	0.691918157	0.691827183	0.693042869	0.695149436
42.5	0.366850297	0.274923677	0.641273974	0.632078223	0.632052913	0.632428852	0.635473829
43.5	0.307222195	0.269009116	0.576231311	0.567166356	0.567594629	0.568234089	0.568288947
44.5	0.245689791	0.262490776	0.508180566	0.497637568	0.498232724	0.49986735	0.499709089
45.5	0.183976147	0.255231919	0.439208067	0.428871678	0.429257728	0.428415846	0.43051941
46.5	0.124310393	0.247045053	0.371355447	0.361279819	0.361340335	0.363774069	0.365110588
47.5	0.069470911	0.237645031	0.307115942	0.298322794	0.298376513	0.299105736	0.300795866
48.5	0.023869963	0.226518614	0.250388576	0.244793155	0.244911162	0.245607439	0.245541894
49.5	0	0.212082908	0.212082908	0.211877795	0.21233006	0.213279836	0.21361311
50.5	0	0.193877346	0.193877346	0.193846555	0.194118851	0.195437357	0.195830976
51.5	0	0.177627176	0.177627176	0.17836534	0.178655141	0.177671217	0.177746615
52.5	0	0.16300925	0.16300925	0.1645211	0.164252279	0.165116628	0.166728781
53.5	0	0.149774612	0.149774612	0.151784984	0.151737226	0.151693993	0.152428437
54.5	0	0.137727514	0.137727514	0.140688132	0.140477583	0.140615189	0.138837728
55.5	0	0.126711349	0.126711349	0.130238098	0.130039014	0.130152866	0.130855339
56.5	0	0.116598949	0.116598949	0.12080072	0.120846958	0.120265328	0.12036211
57.5	0	0.107285703	0.107285703	0.112141365	0.112153021	0.112301201	0.112785193

58.5	0	0.098684574	0.098684574	0.104210441	0.104368345	0.104705494	0.104780648
59.5	0	0.090722416	0.090722416	0.096804737	0.097162838	0.097329055	0.09757314
60.5	0	0.083337204	0.083337204	0.089884983	0.089907106	0.090378413	0.090989382
61.5	0	0.076475919	0.076475919	0.083613698	0.083589202	0.083756952	0.084451011
62.5	0	0.070092914	0.070092914	0.077563115	0.077761605	0.077525532	0.077621678
63.5	0	0.064148627	0.064148627	0.072043074	0.072148822	0.072454576	0.072333804
64.5	0	0.058608565	0.058608565	0.066887812	0.067079278	0.066812308	0.067296359
65.5	0	0.053442489	0.053442489	0.062002822	0.062156602	0.062432178	0.061963487
66.5	0	0.048623755	0.048623755	0.05734392	0.057472021	0.057718321	0.058215578
67.5	0	0.04412878	0.04412878	0.052961351	0.052928984	0.052615704	0.052447661
68.5	0	0.039936594	0.039936594	0.048961264	0.049004897	0.049011999	0.048853014
69.5	0	0.036028481	0.036028481	0.045226062	0.045358816	0.045447568	0.045752353
70.5	0	0.03238767	0.03238767	0.041527804	0.041495484	0.041437875	0.041865066
71.5	0	0.028999084	0.028999084	0.03807994	0.038228775	0.038246226	0.037608722
72.5	0	0.025849119	0.025849119	0.035004596	0.035149386	0.035282814	0.035618154
73.5	0	0.022925465	0.022925465	0.031929408	0.031820344	0.031946491	0.032011789
74.5	0	0.02021695	0.02021695	0.028917732	0.028787911	0.028531474	0.028893276
75.5	0	0.017713406	0.017713406	0.026218593	0.026173297	0.025991209	0.025914171
76.5	0	0.015405554	0.015405554	0.023652999	0.02370228	0.023733941	0.023971354
77.5	0	0.013284904	0.013284904	0.021191689	0.021265583	0.021292191	0.021857034
78.5	0	0.011343669	0.011343669	0.018840072	0.018741139	0.018622006	0.018902736
79.5	0	0.009574695	0.009574695	0.016664997	0.016619623	0.016732711	0.01665047
80.5	0	0.007971388	0.007971388	0.01458058	0.014479603	0.014464068	0.01471853
81.5	0	0.00652766	0.00652766	0.012626456	0.01265879	0.012687879	0.01255164
82.5	0	0.005237881	0.005237881	0.010759623	0.010743524	0.010770981	0.01095801
83.5	0	0.004096832	0.004096832	0.009026086	0.00900732	0.008883941	0.008724471
84.5	0	0.003099664	0.003099664	0.00736179	0.007373114	0.007312377	0.00724076
85.5	0	0.002241866	0.002241866	0.005828797	0.005812829	0.005891298	0.005937423
86.5	0	0.001519235	0.001519235	0.004421726	0.004411841	0.004420557	0.004351165
87.5	0	0.000927843	0.000927843	0.003036544	0.003023476	0.003067117	0.002867105
88.5	0	0.000464018	0.000464018	0.001740126	0.001748349	0.001715566	0.001731615
89.5	0	0.000124319	0.000124319	0.0005717	0.000553889	0.000531531	0.000495861

표 4-10 원뿔형 노즐($r_i=1$, $r_o=6$, $l=6$)의 방사특성 데이터

제 5 장. 실제 노즐의 방사특성

5.1 정지 성막 실험

5.1.1 실험 방법

실제 노즐의 방사특성을 확인하기 위해 점 증발원 방식의 소스를 사용하여 실제 기판에 증착된 두께를 확인해보았다. 점 증발원 방식의 소스는 일반적으로 사각형의 기판 전체에 최대한 균일한 두께의 물질을 증착하기 위해서 기판을 회전시킨다.

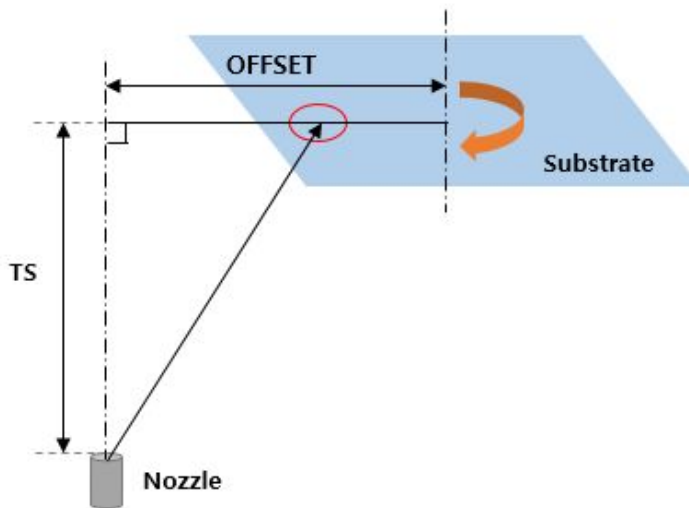


그림 5-1 일반적인 점 소스 구조

본 실험에서는 노즐의 방사특성을 정확하게 확인하기 위해서 기판을 회전시키지 않고 정지한 상태에서 기판에 쌓이는 물질의 두께 변화를 측정하였다.

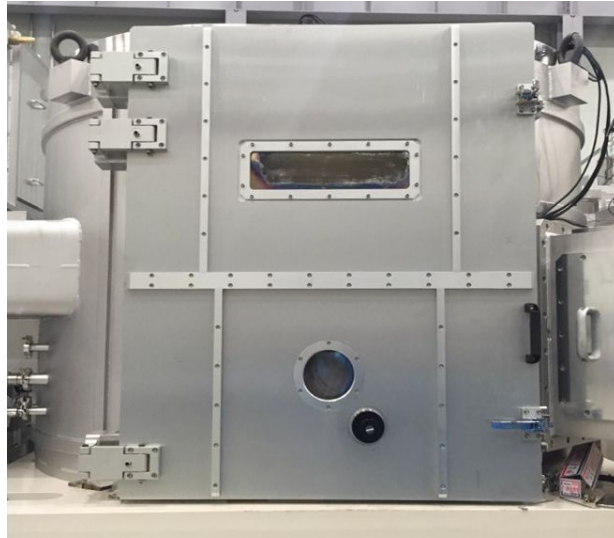


그림 5-2 점 소스 방식의 진공 챔버

실험을 위해서 470cc 의 부피를 갖는 PBN(Pyrolytic Boron Nitride) 재질의 도가니를 사용하였다. 도가니의 반지름은 35.5mm 이고 도가니의 내부 깊이는 119mm 이다.

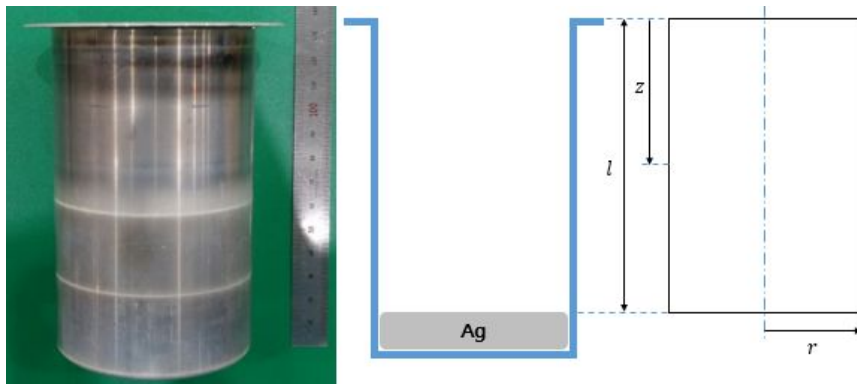


그림 5-3 노즐 역할을 하는 PBN 도가니

도가니의 벽면은 원통형 노즐의 벽면 역할을 하고, 도가니 내부에 채워진 물질의 상면이 물질의 공급부가 된다. 즉 노즐의 입구 역할을 한다. 예를 들어 물질의 높이가 19mm 인 경우 도가니의 전체 길이

119mm 에서 19mm 를 뺀 100mm 가 노즐의 길이가 된다.

증착 물질로는 Ag 를 사용하였다. 서로 다른 노즐의 길이에 대한 노즐의 방사특성을 확인하기 위해 물질의 충전량을 변경하여 두가지 조건에 대해 증착 실험을 진행하였다. 물질의 충전량이 달라지면 도가니 내부에서 물질의 높이가 달라지기 때문에 노즐의 길이가 달라지는 효과를 낼 수 있다. 실험 시작 시점에서 각각 400g, 1500g 물질을 충전하였고 시간당 물질 증발량은 동일하게 1.4g/h 의 조건에서 실험을 진행하였다.

사용한 점 증발원 소스의 도가니와 기관의 거리(TS)는 850mm 로 고정되어 있고, 도가니의 중심과 기관의 중심 사이의 거리(Offset)는 550mm 이다. 기관에 부착된 시편의 위치를 고려하면 노즐 중심에서 가장 근접한 위치의 두께 측정 위치는 수평 거리로 87.5mm 가 되고 가장 먼 위치의 두께 측정 위치는 1012.5mm 가 된다.

기관에 증착된 물질의 두께를 측정하기 위해서 측정 위치에 Si 웨이퍼 시편을 부착하여 증착 실험을 진행하였고, 웨이퍼에 쌓인 물질의 두께 측정을 위해서 KLA Tencor 사의 두께측정기인 알파스텝 IQ 모델(Stylus Surface Profilometer)을 사용하였다.



그림 5-4 물질의 증착 두께 측정 위치

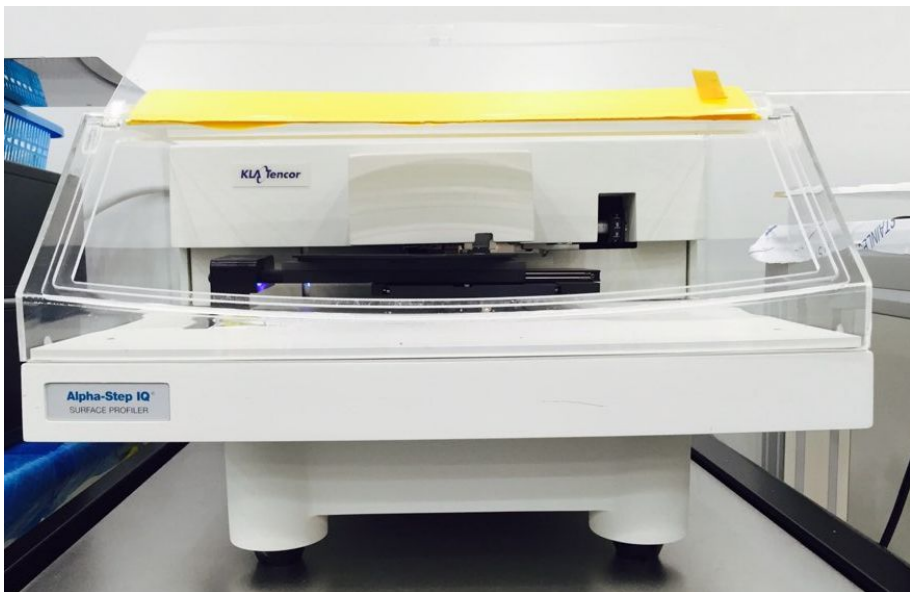


그림 5-5 Alpha-Step IQ

5.1.2 실험 조건

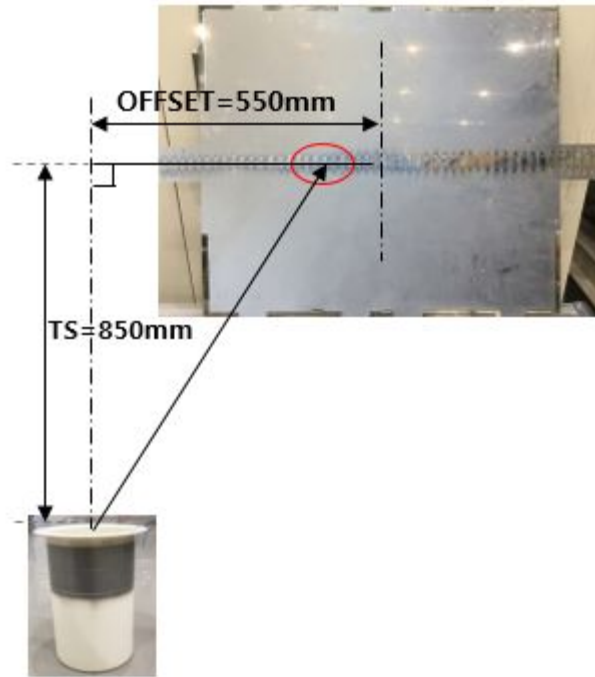


그림 5-6 정지 성막 실험

그림 5-3 에서 설명한 물질 충전량에 따른 노즐의 형상은 다음과 같이 유추할 수 있다.

	CASE 1	CASE 2
Ag 무게 [g]	388.1	1488.1
부피 [mm ³]	36997.1	141858.9
물질 높이 H [mm]	9.3	35.8
노즐 길이 L [mm]	109.7	83.2
노즐 반경 R [mm]	35.5	35.5
L/R	3.089	2.343

표 5-1 실험 조건

Ag 의 무게는 실험 시작 전과 실험 종료 후 평균 무게이고, Ag 의

밀도를 고려하면 물질의 평균 높이는 각각 9.3mm, 35.8mm 가 된다. 도가니 전체 길이에서 물질의 높이를 빼 길이가 노즐의 길이가 되고 이는 각각 109.7mm, 83.2mm 가 된다.

앞선 제 3 장에서 원통형 노즐의 방사특성은 ‘노즐의 길이/노즐의 반지름’의 함수로 나타낼 수 있다는 것을 보였고, 본 실험에서 노즐의 방사특성에 영향을 주는 변수 L/R 은 각각 3.089, 2.343 이 된다.

노즐과 기관 사이의 수직 거리에 해당하는 TS 는 850mm 이고, 노즐 중심에서 수평 거리로 87.5mm 위치부터 1012.5mm 위치까지 증착된 물질의 두께를 측정하였다. 표 5-2 의 Position 은 노즐 중심에 대한 수평거리이다.

5.1.3 실험 결과

No.	Position [mm]	CASE 1 [Å]	CASE 2 [Å]	No.	Position [mm]	CASE 1 [Å]	CASE 2 [Å]
1	87.5	20601.5	17902	26	559.4	5953	5303.5
2	106.4	20196	17050	27	578.3	5474.5	5094
3	125.3	19655.5	16880	28	597.2	5181.5	4846
4	144.1	18601	16044.5	29	616.1	4839.5	4679.5
5	163.0	17997.5	15789.5	30	634.9	4634	4307
6	181.9	17379	15444	31	653.8	4442	4000.5
7	200.8	16671.5	14831.5	32	672.7	4108.5	3712
8	219.6	15854.5	14278	33	691.6	3906	3515.5
9	238.5	15241	13688	34	710.5	3543	3306
10	257.4	14694.5	13110	35	729.3	3328	3037
11	276.3	14046	12395.5	36	748.2	3113.5	2894.5
12	295.2	13404	11722.5	37	767.1	3063	2773
13	314.0	12485	11511	38	786.0	2850.5	2520.5
14	332.9	11916.5	10852.5	39	804.8	2756	2419.5
15	351.8	11241.5	10209	40	823.7	2665	2333
16	370.7	10445	9607.5	41	842.6	2561	2217.5
17	389.5	10177.5	9220	42	861.5	2440.5	2085
18	408.4	9405	8795	43	880.4	2219	1932
19	427.3	9048.5	8074	44	899.2	2156	1842.5
20	446.2	8380	7863.5	45	918.1	2058	1741
21	465.1	7867	7317.5	46	937.0	1923	1599.5
22	483.9	7391.5	6912.5	47	955.9	1769	1545.5
23	502.8	6944.5	6477	48	974.7	1743	1447.5
24	521.7	6789	6046.5	49	993.6	1727	1394
25	540.6	6309.5	5634.5	50	1012.5	1574	1295

표 5-2 기관에 증착된 Ag 두께

표 5-2 는 노즐 중심에서 수직 방향으로 850mm 떨어진 위치의

기판에 증착된 Ag 의 두께를 알파스텝을 이용하여 측정한 결과이다. 표 5-2 의 결과를 그래프로 나타내면 다음과 같다.

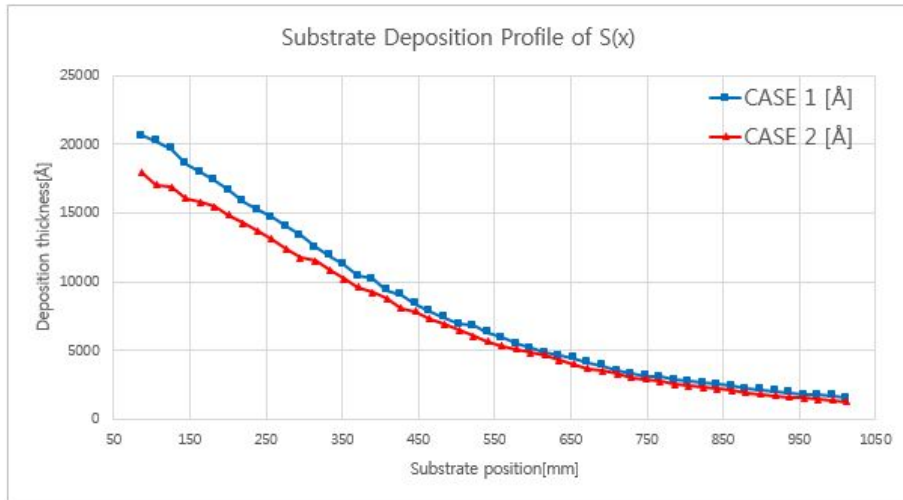


그림 5-7 기판에 증착된 Ag 두께

노즐의 중심에서 수평 거리가 멀어질수록 기판에 쌓이는 물질의 두께가 감소하는 것을 확인할 수 있다. 그림 5-7 은 X 축을 노즐 중심에서의 거리로 나타낸 그래프이고, X 축을 노즐의 중심축에 대한 각도, 즉 방사각도로 나타내기 위해서는 식 (2.5)의 관계식을 이용할 수 있다.

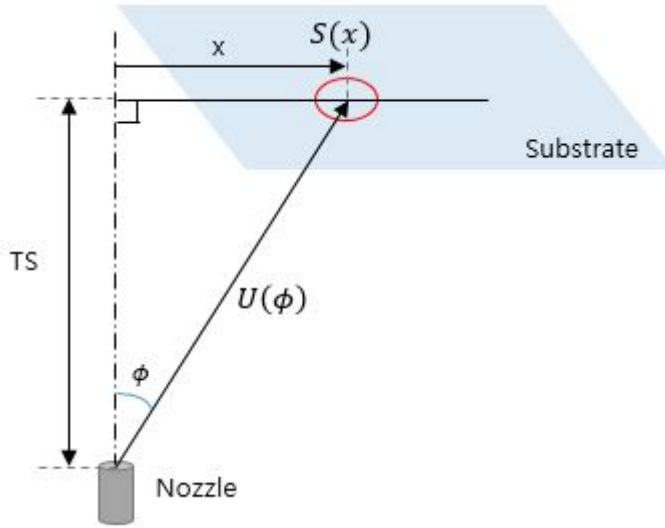


그림 5-8 증착 두께에 따른 방사특성

노즐의 방사특성 $U(\phi)$ 로 방출된 분자가 수직방향으로 TS , 수평방향으로 x 만큼 떨어진 위치에 쌓이는 양 $S(x)$ 는 다음과 같은 관계를 갖는다.

$$S(x) = U(\phi) \frac{\cos\phi}{L^2} \quad (5.1)$$

이때 방사각도에 해당하는 ϕ 와 노즐에서부터의 거리에 해당하는 L 은 다음과 같다.

$$\phi = \tan^{-1} \left(\frac{x}{TS} \right) \quad (5.2)$$

$$L = \sqrt{TS^2 + x^2} \quad (5.3)$$

식 (5.1)을 이용하여 그림 5-7 의 증착 두께를 방사특성 $U(\phi)$ 로 나타내면 다음과 같다.

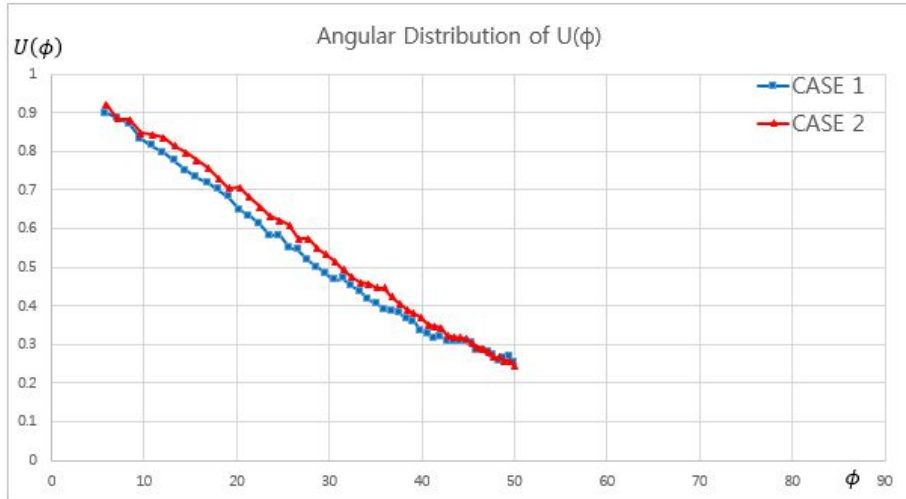


그림 5-9 정지 성막 실험의 방사특성

5.2 몬테카를로 시뮬레이션

5.2.1 시뮬레이션 방법

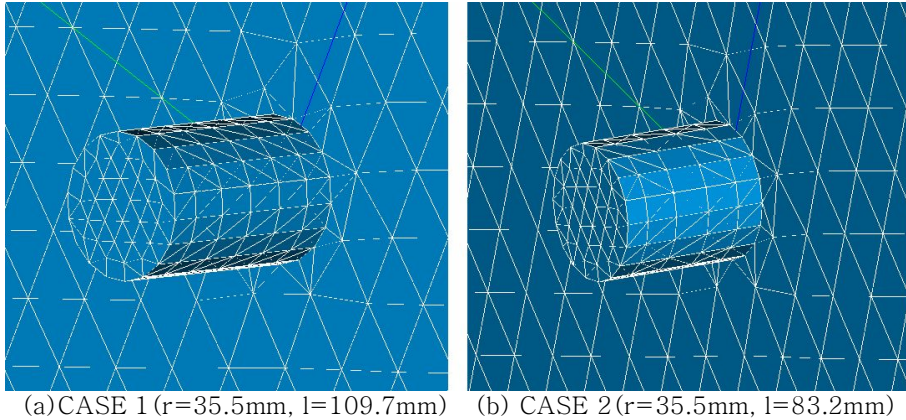


그림 5-10 시뮬레이션 노즐 형상

정지 성막 실험 결과를 검증해보기 위해서 몬테카를로 시뮬레이션을 수행하였다. 표 5-1 에서 설명한 것처럼 노즐 반지름 35.5mm 은 동일하게 하고 노즐의 길이에 해당하는 109.7mm, 83.2mm 두가지 경우에 대해서 모델링을 하였다. 실제 정지 성막 실험에서 노즐부터 기관까지의 거리는 850mm 로 고정되어 있지만, 노즐과 기관 사이 거리 변화에 따른 증착 프로파일 변화 경향을 확인하기 위해서 노즐과 기관 사이의 거리 350mm, 600mm, 850mm, 1100mm, 1350mm 에 대해서도 시뮬레이션을 수행하였다.

그림 5-11 을 보면 동일한 각도 ϕ 로 방출된 분자가 노즐과 기관 사이의 거리가 멀어짐에 따라 노즐 중심에서 점점 먼 위치에 증착되는 것을 볼 수 있다. 만약 노즐에서 방출되는 모든 분자가 그림 5-11 처럼 노즐 출구 중심의 한 점(point)에서 방출된다면 노즐과 기관 사이의 거리 변화와 무관하게 표 5-2 나 그림 5-7 과 같은 증착된 물질의 두께

프로파일을 이용하면 항상 동일한 방사특성 함수 $U(\phi)$ 를 구할 수 있다.

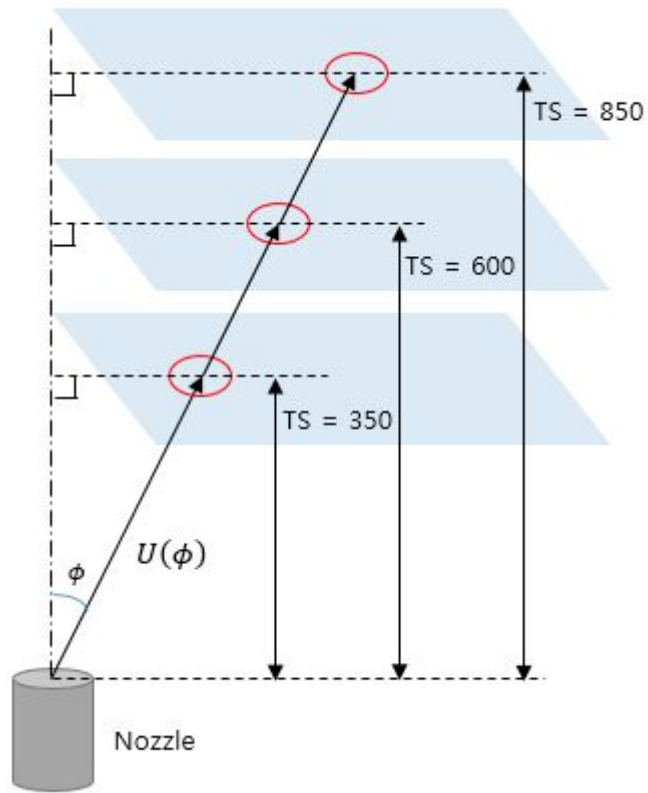


그림 5-11 노즐부터 기관까지의 거리 변화

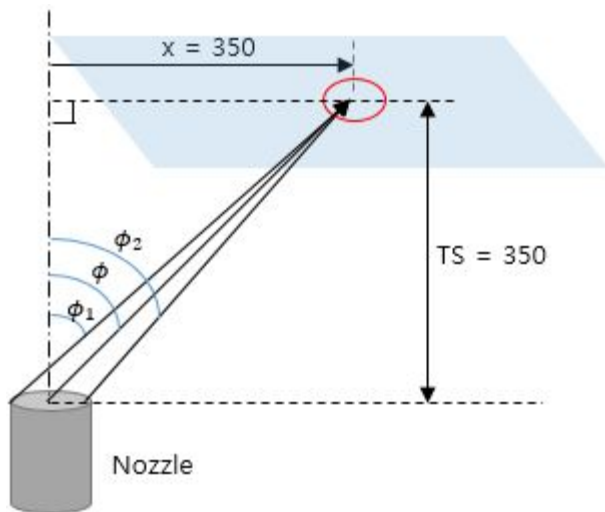


그림 5-12 노즐 위치에 따른 방사 각도 변화

하지만 노즐에서 방출되는 분자는 한 점(Point)에서 방출되는 것이 아니라 노즐 출구 면적 전체에서 방출되기 때문에 문제가 생긴다. 예를 들어 그림 5-12 에서 노즐부터 수직 거리가 350mm 노즐 중심에서부터 수평 거리가 350mm 위치에 쌓이는 물질을 보면, 노즐 중심에서 45° 각도로 방출되는 분자도 있지만, 노즐의 가장 왼쪽 부분에서는 47.7° , 노즐의 가장 오른쪽 부분에서는 41.9° 로 방출된 분자가 해당 지점에 도달하게 된다. 이러한 특성은 노즐의 반지름에 비해 노즐과 기관 사이의 거리가 가까운 경우 큰 영향을 주게 된다.

이러한 노즐과 기관 사이의 거리 변화에 의한 증착 두께 변화를 확인하기 위해 몬테카를로 시뮬레이션을 수행하였다.

다음은 표 5-3 과 표 5-4 는 시뮬레이션 조건에 따른 차이를 나타낸 표이다. 동일한 노즐 형상에 대해서 노즐과 기관 사이의 거리를 다르게 설정하여 10 가지 경우에 대해서 시뮬레이션을 수행하였다.

	CASE 1-1	CASE 1-2	CASE 1-3	CASE 1-4	CASE 1-5
Radius (mm)	35.3	35.3	35.3	35.3	35.3
Nozzle Length (mm)	109.7	109.7	109.7	109.7	109.7
Nozzle to Substrate (mm)	350	600	850	1100	1350
Time Step (sec)	2E-06	2E-06	2E-06	2E-06	2E-06
Iteration #	6.25E+07	4.25E+07	4.25E+07	4.05E+07	3.65E+07
simulation time (sec)	125	85	85	81	73
inlet mesh #	74	74	74	74	74
nozzle bound mesh #	396	432	262	410	432
chamber mesh #	19606	21214	22302	23350	25694
Execution Time (sec)	154605	141193	161849	164498	165843
Execution Time (hr)	42.95	39.22	44.96	45.69	46.07
Outlet Particle #	2.75E+07	1.85E+07	1.85E+07	1.76E+07	1.59E+07

표 5-3 CASE 1 (r=35.5, l=109.7)

	CASE 2-1	CASE 2-2	CASE 2-3	CASE 2-4	CASE 2-5
Radius (mm)	35.3	35.3	35.3	35.3	35.3
Nozzle Length (mm)	83.2	83.2	83.2	83.2	83.2
Nozzle to Substrate (mm)	350	600	850	1100	1350
Time Step (sec)	2E-06	2E-06	2E-06	2E-06	2E-06
Iteration #	9.20E+07	7.00E+07	5.80E+07	5.30E+07	4.90E+07
simulation time (sec)	184	140	116	106	98
inlet mesh #	74	74	74	74	74
nozzle bound mesh #	252	216	224	216	216
chamber mesh #	19606	21214	22302	23350	25694
Execution Time (sec)	261617	262835	264165	261489	265405
Execution Time (hr)	72.67	73.01	73.38	72.64	73.72
Outlet Particle #	4.96E+07	3.55E+07	2.94E+07	2.68E+07	2.47E+07

표 5-4 CASE 2 (r=35.5, l=83.2)

5.2.2 노즐의 방사특성을 구하는 방법

몬테카를로 시뮬레이션 결과를 통해 노즐의 방사특성을 구하는 방법은 크게 두 가지 방법이 있다.

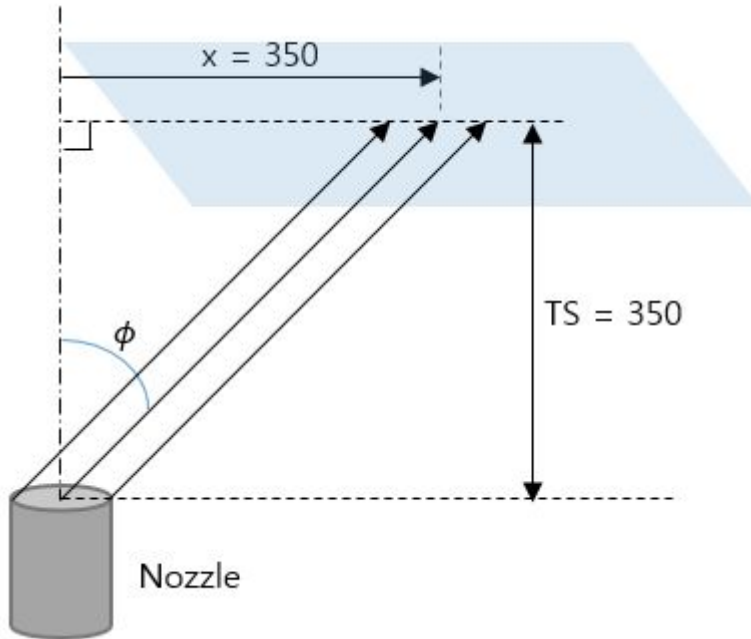


그림 5-13 노즐의 방사특성 계산방법 A

첫번째 방법은 기관에 입사된 분자의 각도를 그대로 노즐의 방사특성으로 사용하는 방법이다. 그림 5-13 을 보면 동일한 각도 $\phi = 45^\circ$ 로 방출된 분자가 기관의 서로 다른 위치에 도달하는 것을 알 수 있다. 노즐의 반지름을 35.5 라고 하면 왼쪽의 경로로 방출된 분자가 기관에 도달하는 위치는 $x=314.5$, 중심에서 방출된 분자가 기관에 도달하는 위치는 $x=350$, 오른쪽 경로로 방출된 분자는 $x=385.5$ 위치에 도달한다. 이러한 차이점이 있지만 세가지 경우 모두 $\phi = 45^\circ$ 로 방출된 분자이기 때문에 노즐의 방사특성을 계산할 때 모두 45° 로

방출되는 분자로 계산하는 방법이다. 이러한 방법은 제 3 장과 제 4 장에서 적분 계산을 통해 노즐의 방사특성을 구할 때 사용한 방법과 비슷한 방법이다.

이러한 방법의 단점은 노즐과 기관 사이 거리가 가까워 지는 경우 실제 기관에 증착된 물질의 두께와 계산된 노즐의 방사특성과 차이가 생기게 된다. 노즐이 작아지거나 노즐과 기관 사이의 거리가 멀어지는 경우 이러한 차이는 점점 작아진다. 몬테카를로 시뮬레이션을 수행하는 측면에서는 노즐과 기관 사이 거리에 따라 노즐의 방사특성이 변하지 않기 때문에 노즐 형상에 대한 시뮬레이션을 한번만 수행하면 된다.

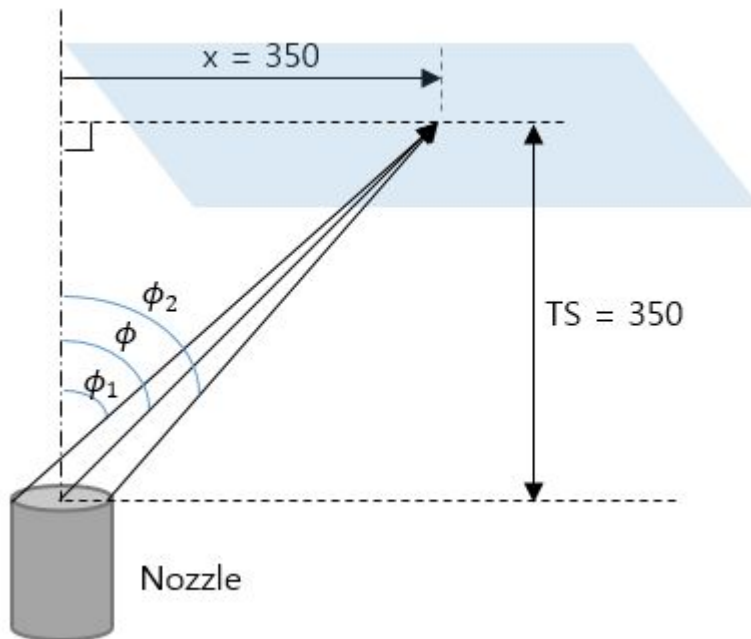


그림 5-14 노즐의 방사특성 계산방법 B

두번째 방법은 기관에 도달한 분자의 위치를 노즐의 방사특성으로 사용하는 방법이다. 그림 5-14 를 보면 노즐 출구면의 위치에 따라 서로 다른 각도로 방출된 분자가 노즐 중심에서 $\phi = 45^\circ$ 를 이루는

지점인 $x=350$ 인 위치에 입사된다. 이때 노즐에서 방출된 각도와 무관하게 기관에 입사된 위치를 노즐의 방사특성으로 사용하는 방법이다. 즉 세가지 경로 모두 방사특성 $\phi=45^\circ$ 인 분자로 계산한다. 이러한 과정을 통해 노즐의 방사특성 함수를 구할 수 있다.

이러한 방법의 장점은 시뮬레이션을 통해 구한 노즐의 방사특성이 실제 기관에 증착되는 물질의 두께를 정확하게 반영할 수 있다. 하지만 실제 노즐에서 방출된 분자의 각도를 반영하지 않기 때문에 노즐과 기관 사이가 달라지는 경우 오차가 커지기 때문에 시뮬레이션을 다시 수행해야한다. 또 앞에서 설명한 첫번째 방법인 기관에 입사되는 분자의 각도를 사용해서 구한 방사특성과 항상 다른 다른 방사특성 값을 나타내게 된다.

이러한 문제는 몬테카를로 시뮬레이션뿐만 아니라 5.1 에서 설명한 정지 성막 실험에도 그대로 적용되는 문제이다. 정지 성막 실험에서는 해당 위치에 증착된 물질의 두께는 측정할 수 있지만, 해당 입자가 노즐의 어느 위치에서 왔는지 확인할 방법은 없다.

본 연구에서 수행한 정지 성막 실험에서는 노즐과 기관 사이의 거리를 850mm 로 고정한 상태로 실험을 진행하였고, 몬테카를로 시뮬레이션에서는 노즐과 기관 사이 거리를 850mm 인 위치를 포함하여 다양한 거리에 대해서 시뮬레이션을 수행하였다.

5.2.3 시뮬레이션 결과

다음은 표 5-1 의 CASE 1 에 해당하는 몬테카를로 시뮬레이션 결과이다. 5.2.1 에서 설명한 첫번째 방법인 기관에 도달하는 분자의 방향을 이용하여 노즐의 방사특성을 계산하였다.

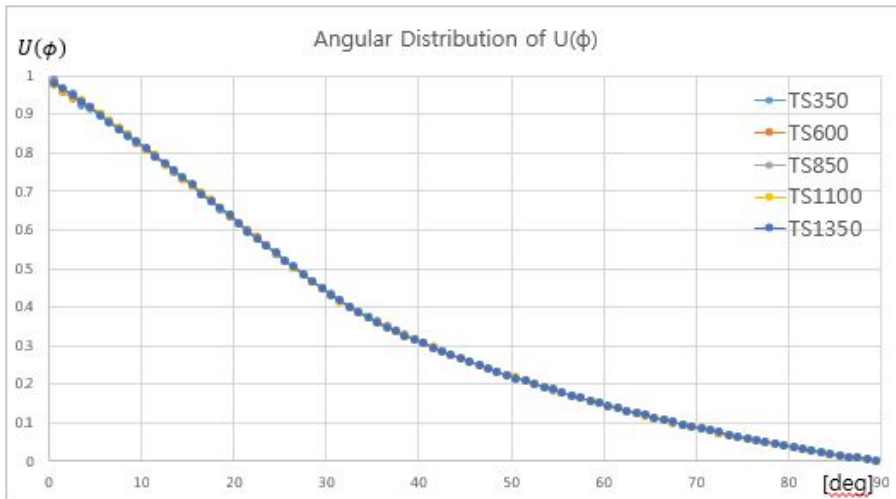


그림 5-15 방사각도에 의한 CASE 1 노즐의 방사특성

노즐과 기관 사이의 거리(TS)에 무관하게 노즐의 방사특성이 동일한 것을 볼 수 있다. 이는 노즐의 출구에서 방출되는 분자의 방향은 노즐의 길이 노즐의 반지름 같은 노즐의 형상에만 영향을 받고 노즐 출구를 벗어난 분자가 기관에 부딪히는 높이에는 무관하기 때문이다

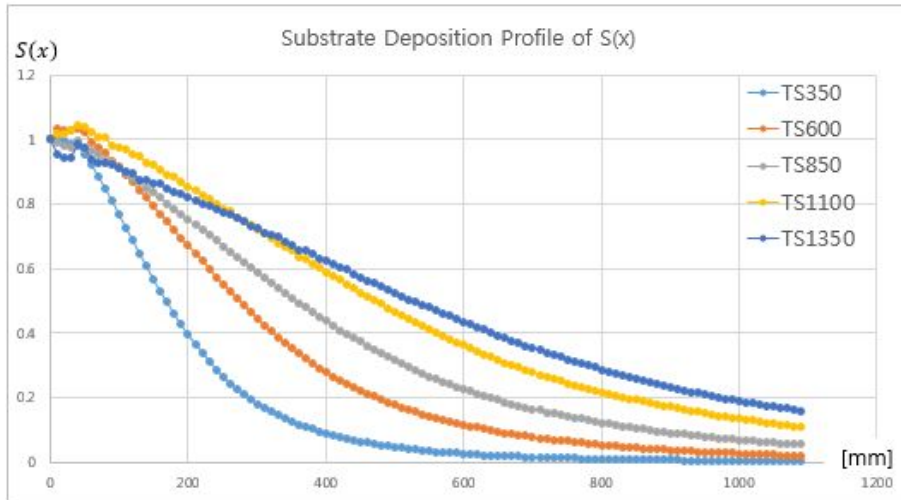


그림 5-16 CASE 1 노즐의 위치별 증착 두께

그림 5-16 은 몬테카를로 시뮬레이션을 통해 노즐에서 일정거리 떨어진 기판에 쌓이는 물질의 두께 프로파일을 시뮬레이션한 결과이다. 비교를 용이하게 하기 위해 노즐에서 가장 가까운 기판 위치의 두께를 기준으로 노멀라이즈하였다. 노즐과 기판 사이 거리(TS)가 350mm 인 위치에서는 노즐 중심에 가까운 위치에 물질이 두껍게 쌓이고 노즐 중심에서 멀어질수록 물질의 두께가 급하게 감소하는 것을 볼 수 있다. 반면에 노즐과 기판 사이 거리(TS)가 1350mm 인 위치에서는 두께 변화가 완만하게 일어나는 것을 볼 수 있다.

기판에 증착된 두께 형상 정보는 5.2.1 에서 설명한 두번째 방법을 이용하여 노즐의 방사특성을 계산할 수 있다. 식 (5.1)을 이용하여 그림 5-16 의 증착 형상에서 노즐의 방사특성을 계산하면 다음과 같다.

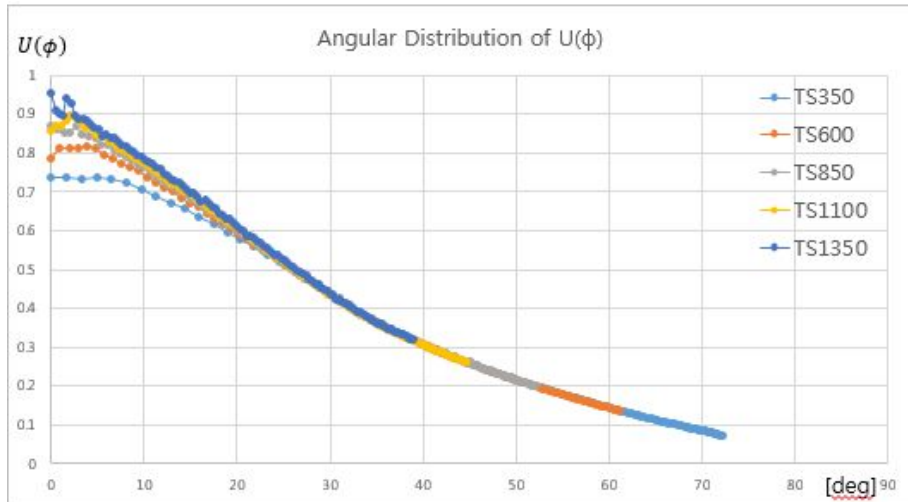
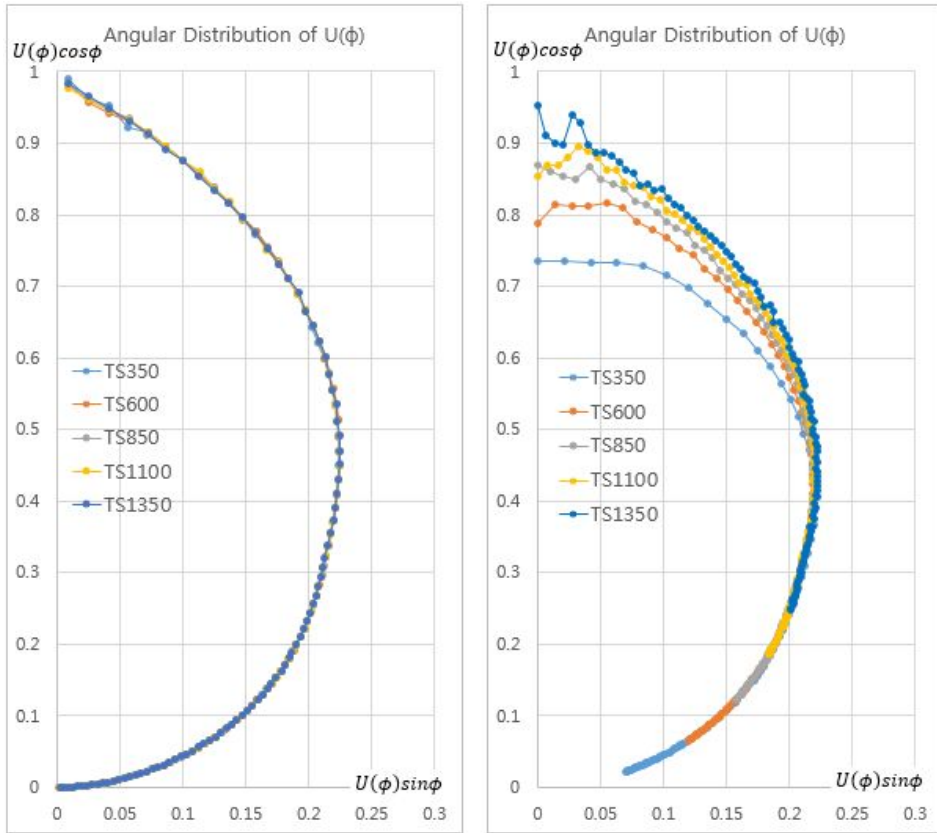


그림 5-17 증착 형상에 의한 CASE 1 노즐의 방사특성

그림 5-15 와 다르게 노즐과 기판 사이 거리(TS)가 변함에 따라 노즐의 방사특성이 변하는 것을 볼 수 있다.

다음은 그림 5-15 의 방사특성과 그림 5-17 의 방사특성을 X 축을 $U(\phi)\sin\phi$, Y 축을 $U(\phi)\cos\phi$ 하여 나타낸 그래프이다.



(a) 방사각도에 의한 방사특성

(b) 증착 형상에 의한 방사특성

그림 5-18 CASE 1 노즐의 방사특성

방사각도를 이용하여 구한 노즐의 방사특성은 노즐과 기관 사이 거리(TS) 변화에 의한 차이가 없지만 증착 형상으로 구한 노즐의 방사특성은 노즐과 기관 사이 거리(TS)가 변함에 따라 방사특성이 크게 달라지는 것을 확인할 수 있다.

다음은 표 5-1 의 CASE 2 에 해당하는 몬테카를로 시뮬레이션 결과이다. 5.2.1 에서 설명한 첫번째 방법인 기관에 도달하는 분자의 방향을 이용하여 노즐의 방사특성을 계산하였다.

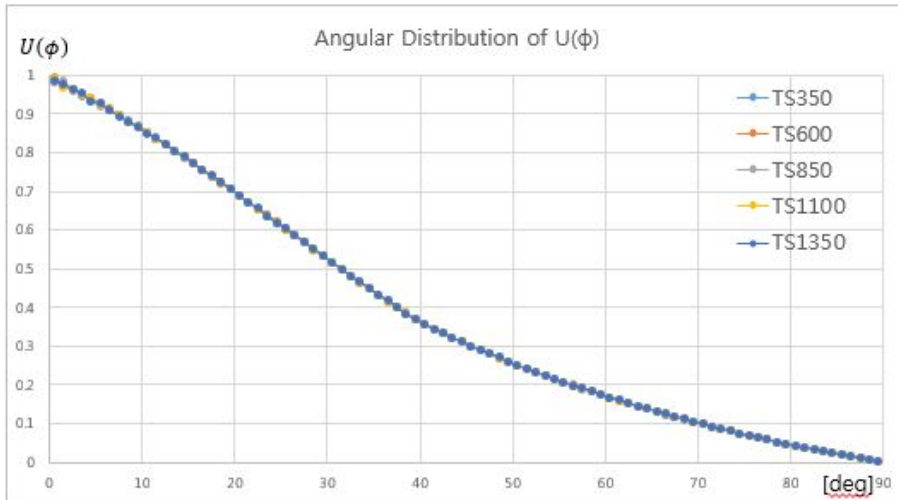


그림 5-19 방사각도에 의한 CASE 2 노즐의 방사특성

다음 그림 5-20 은 몬테카를로 시뮬레이션을 통해 CASE 2 노즐에서 일정거리 떨어진 기관에 쌓이는 물질의 두께 프로파일을 시뮬레이션한 결과이다.

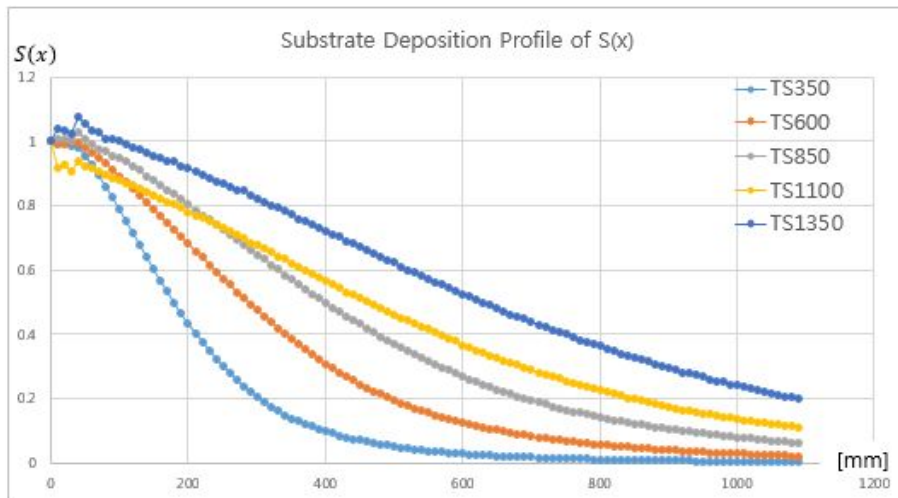


그림 5-20 CASE 2 노즐의 위치별 증착 두께

다음은 5.2.1 에서 설명한 두번째 방법을 이용하여 노즐의 방사특성을

계산하였다. 식(5.1)을 이용하여 그림 5-20 의 증착 형상에서 노즐의 방사특성을 계산하면 다음과 같다.

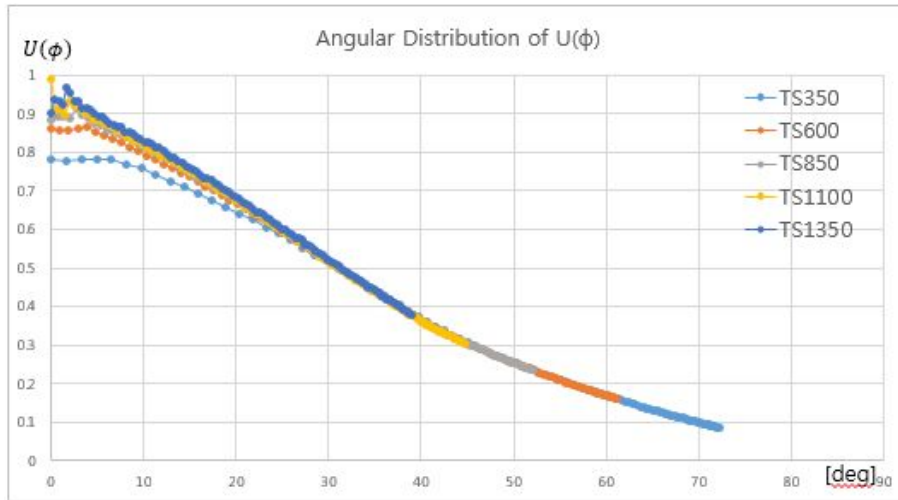
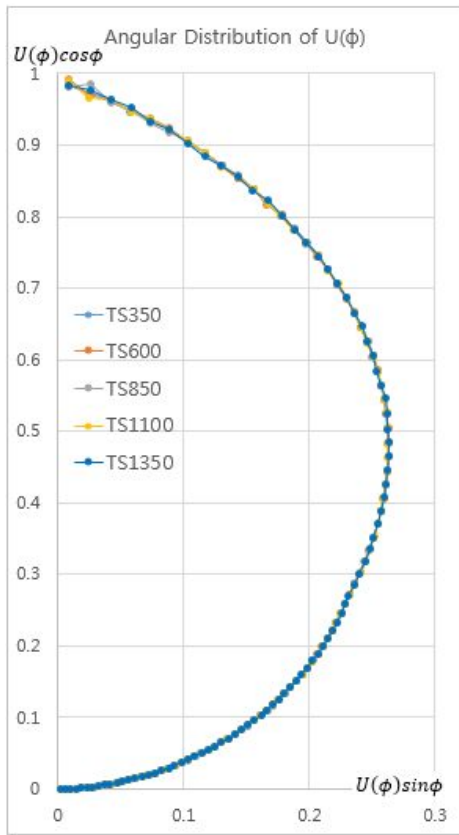
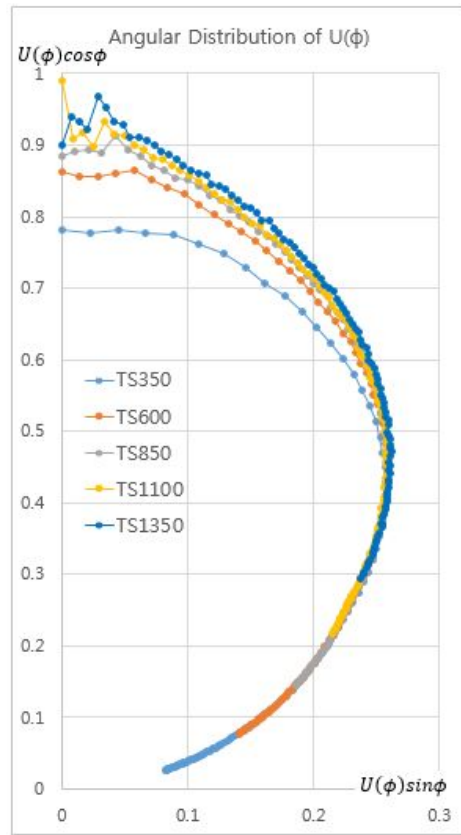


그림 5-21 증착 형상에 의한 CASE 2 노즐의 방사특성

다음은 그림 5-19 의 방사특성과 그림 5-21 의 방사특성을 X 축을 $U(\phi)\sin\phi$, Y 축을 $U(\phi)\cos\phi$ 하여 나타낸 그래프이다.



(a) 방사각도에 의한 방사특성



(b) 증착 형상에 의한 방사특성

그림 5-22 CASE 2 노즐의 방사특성

5.3 방사특성 결과 비교

5.3.1 정지 성막 실험 결과(CASE 1)

다음은 표 5-1 의 CASE 1 에 해당하는 노즐의 정지 성막 실험의 증착 두께를 방사특성으로 변환한 그림 5-9 의 방사특성 결과와 제 3 장에서 구한 노즐의 방사특성에 대한 해석적 해와 5.2.2 에서 설명한 첫번째 방법인 기관에 입사되는 분자의 각도로 방사특성을 계산한 몬테카를로 시뮬레이션 결과를 비교한 그래프이다.

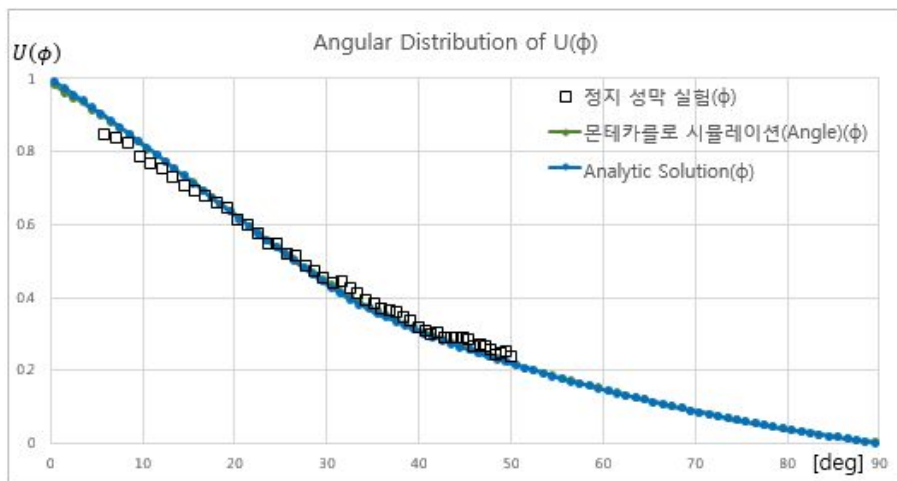


그림 5-23 정지 성막 실험의 방사특성 비교

분자의 입사각으로 구한 방사특성과 해석적 해의 방사특성은 거의 일치하지만, 정지 성막 실험의 방사특성 결과와는 다소 차이가 있는 것을 확인할 수 있다. 정지 성막 실험의 방사특성 값은 5.88° 에서 49.9° 의 범위에 걸쳐서 구하였고 이 구간에서 해석적 해의 방사특성의 평균값은 0.45786 이고 이 구간에서 해석적 해와 정지성막 실험의 방사특성 사이의 RMSE 는 $2.26E-02$ 로 계산되었다. 이 값은 평균

방사특성값 대비 4.93%로 다소 크게 확인되었다.

이 차이는 앞에서 설명한것처럼 노즐의 방사특성에 대한 해석적 해는 노즐의 크기를 한 점으로 가정을 했기 때문에 노즐의 크기 대비 노즐과 기관 사이의 거리가 가까울수록 오차가 커지게 된다.

다음 그림 5-24 는 정지 성막 실험의 방사특성과 정지 성막 실험 조건과 동일한 노즐-기관 사이 거리인 850mm 의 조건에서 몬테카를로 시뮬레이션을 통해 구한 노즐의 방사특성을 비교한 그래프이다. $5.88^{\circ} \sim 49.9^{\circ}$ 구간에서 몬테카를로 시뮬레이션의 방사특성의 평균값은 0.46735 이고 이 구간에서 정지 성막 실험의 방사특성과 몬테카를로 시뮬레이션의 방사특성 사이의 RMSE 는 2.21%로 확인되었다.

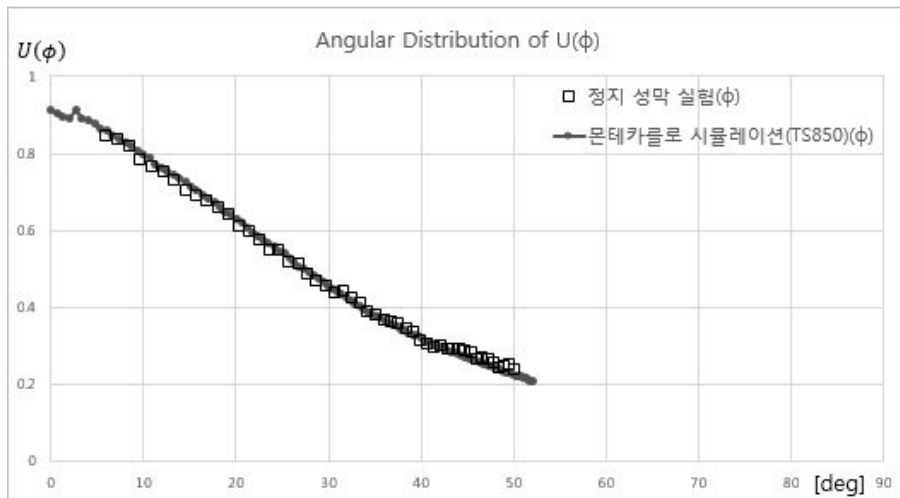


그림 5-24 정지 성막 실험의 방사특성 비교

다음 그림 5-25 는 정지 성막 실험의 방사특성, 해석적 해의 방사특성, 몬테카를로 시뮬레이션의 방사특성을 같이 나타낸 그래프이다. 정지 성막 실험의 방사특성은 해석적 해보다 노즐-기관 사이 거리를

850mm 로 시뮬레이션한 몬테카를로 시뮬레이션의 방사특성과 더 일치하는 것을 확인할 수 있다.

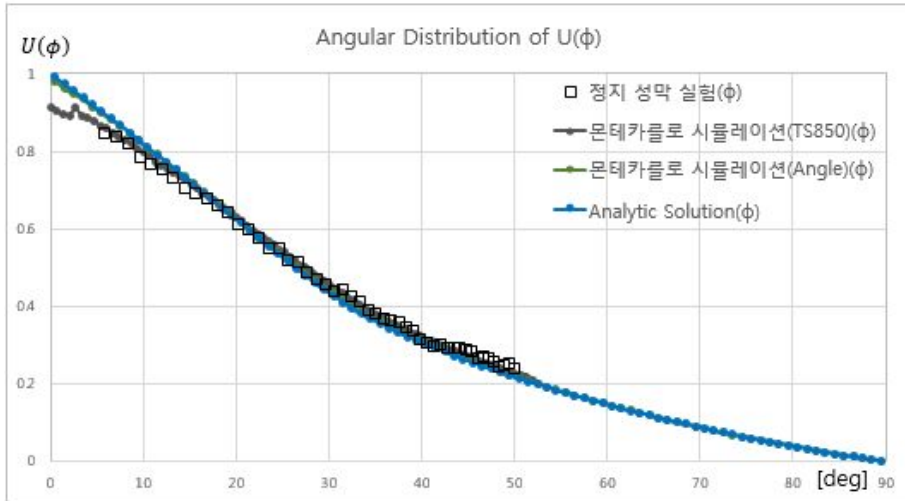


그림 5-25 정지 성막 실험의 방사특성 비교

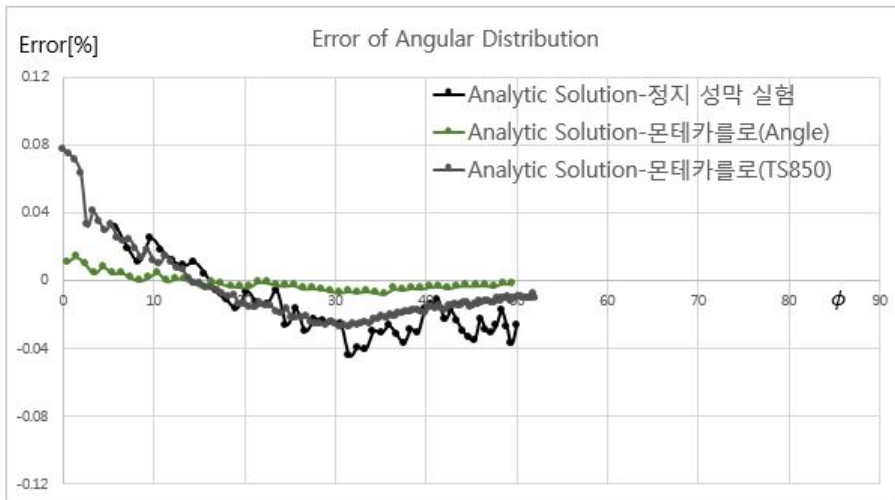


그림 5-26 해석적 해에 대한 방사특성 차이

그림 5-26 은 해석적 해에 대한 각각의 방사특성 차이값을 나타낸 그래프이다. 몬테카를로 시뮬레이션(Angle)의 방사특성은 해석적 해의

방사특성에 대해서 RMSE 기준 0.89%의 오차를 보이고, 정지 성막 실험의 방사특성과 몬테카를로 시뮬레이션(TS850)의 방사특성은 각각 RMSE 기준 4.93%, 4.72% 오차를 보였다. 그림 5-26의 그래프에서도 정지 성막 실험의 방사특성이 몬테카를로 시뮬레이션(TS850)의 방사특성과 유사한 경향을 보이는 것을 확인할 수 있다. 상호간의 RMSE 기준 오차는 2.21% 였다. 그래프 상으로는 두 방사특성의 경향이 유사해보이지만 실제 성막실험의 측정 오차등으로 비교적 큰 오차를 보이는 것으로 생각된다.

각각의 RMSE 오차는 측정 위치의 방사특성값의 평균 대비 RMSE 값으로 계산하였다.

다음 그림 5-27은 노즐의 방사특성 차이를 다른 관점에서 볼 수 있도록 그림 5-25의 방사특성을 다르게 표현한 그래프이다. 해석적 해의 방사특성과 몬테카를로 시뮬레이션(Angle)의 방사특성은 거의 동일하고, 정지 성막 실험의 방사특성과 몬테카를로 시뮬레이션의 (TS850)의 방사특성이 비슷한 경향을 보이는 것을 확인할 수 있다.

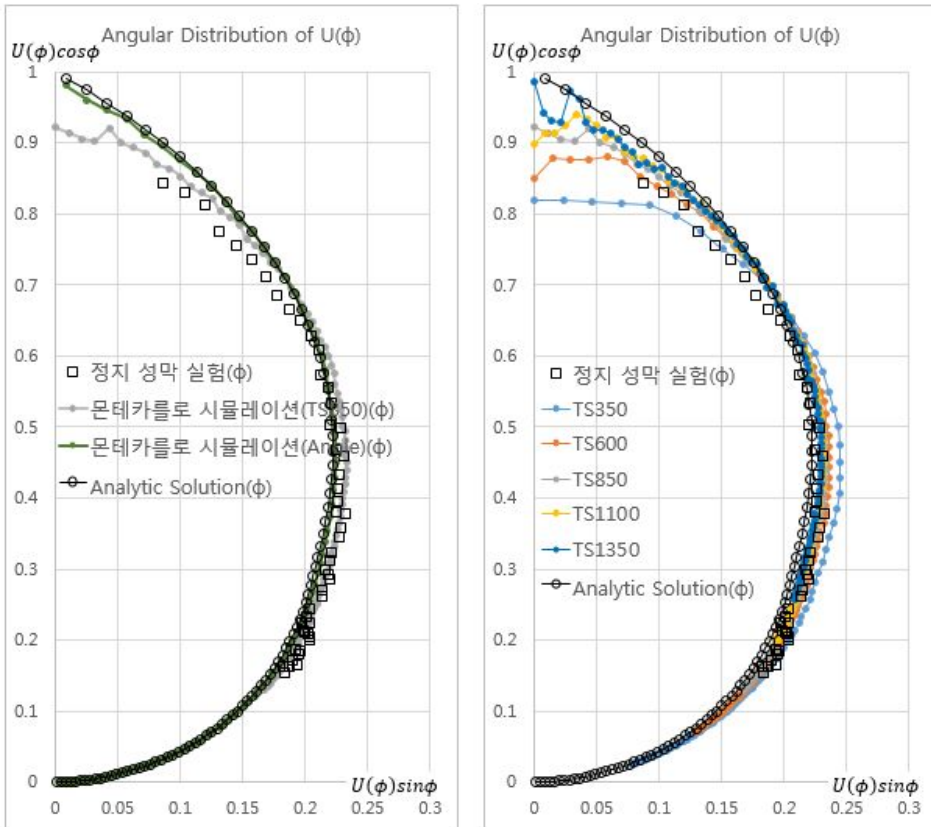


그림 5-27 정지 성막 실험의 방사특성 비교

다음 그림 5-28 은 노즐과 기관 사이 거리에 따라서 해석적 해에 대한 몬테카를로 시뮬레이션 사이의 RMSE 를 나타낸 그래프이다. 거리가 멀어짐에 몬테카를로 시뮬레이션의 방사특성이 해석적 해에 수렴하는 것을 확인할 수 있다.

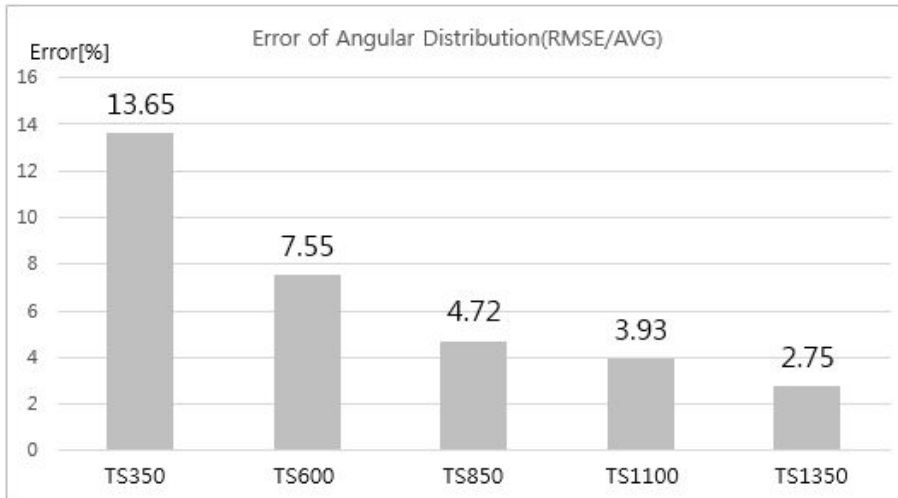


그림 5-28 해석적 해에 대한 방사특성 차이 (RMSE/AVG)

5.3.2 정지 성막 실험 결과(CASE 2)

다음은 표 5-1 의 CASE 2 에 해당하는 노즐의 정지 성막 실험의 증착 두께를 방사특성으로 변환한 그림 5-9 의 방사특성 결과와 제 3 장에서 구한 노즐의 방사특성에 대한 해석적 해와 5.2.2 에서 설명한 첫번째 방법인 기관에 입사되는 분자의 각도로 방사특성을 계산한 몬테카를로 시뮬레이션 결과를 비교한 그래프이다.

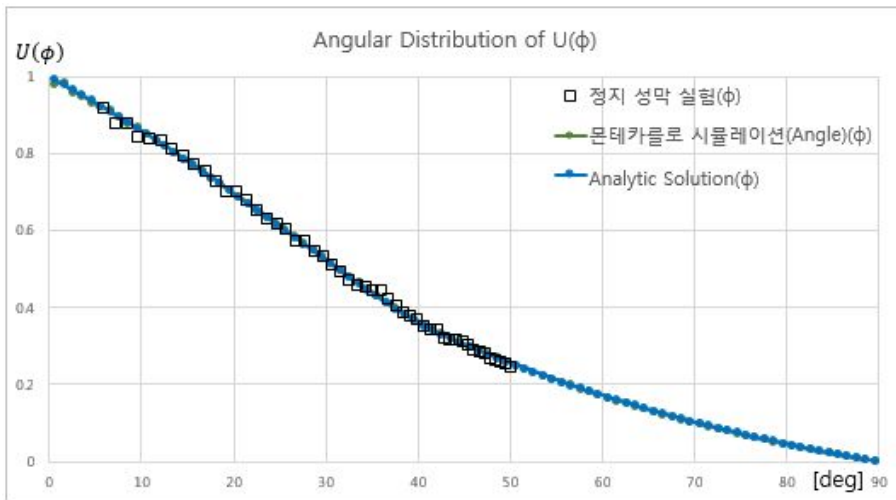


그림 5-29 정지 성막 실험의 방사특성 비교

CASE 1 의 경우와 다르게 정지 성막 실험의 방사특성이 해석적 해의 방사특성과 거의 일치하는 결과를 얻을 수 있었다. 방사특성의 평균값은 0.517852 였고 RMSE 값은 0.007839 로 평균대비 1.51% 수준의 값을 보였다. 반면에 노즐과 거리가 850mm 떨어진 기관의 몬테카를로 시뮬레이션의 방사특성과는 RMSE 가 2.52% 수준의 값을 보였다. 이는 CASE 1 의 노즐의 2.21%와 비슷한 수준으로 정지 성막 실험과 몬테카를로 시뮬레이션의 오차 수준이 2.2~2.5% 수준을 보이는 것을

확인할 수 있다.

다음 그림 5-30 은 정지 성막 실험의 방사특성과 몬테카를로 시뮬레이션(TS850)의 방사특성을 비교한 그래프이다. 그림 5-29 보다 오히려 큰 오차를 보이는 것을 확인할 수 있었다.

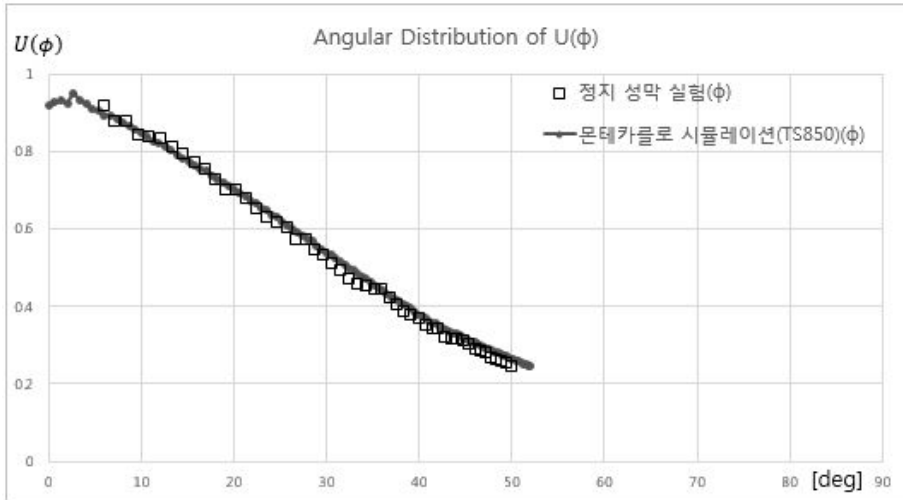


그림 5-30 정지 성막 실험의 방사특성 비교

다음 그림 5-31 는 정지 성막 실험의 방사특성, 해석적 해의 방사특성, 몬테카를로 시뮬레이션의 방사특성을 같이 나타낸 그래프이다.

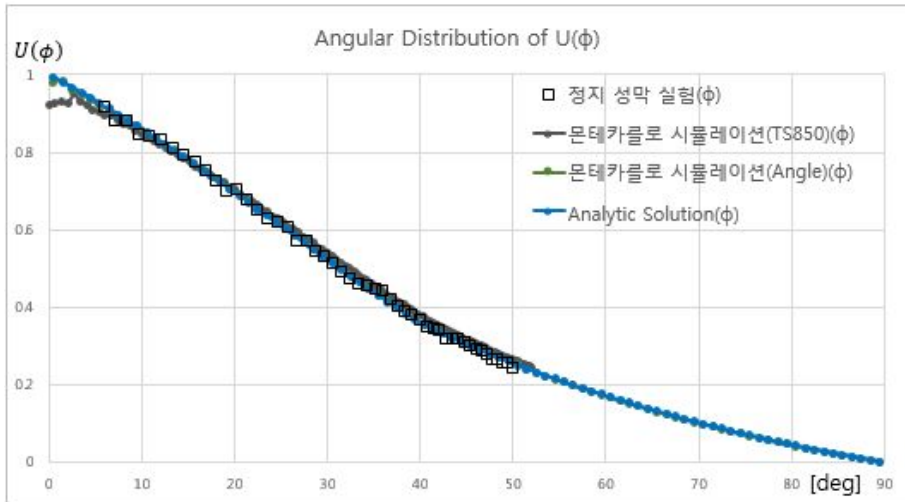


그림 5-31 정지 성막 실험의 방사특성 비교

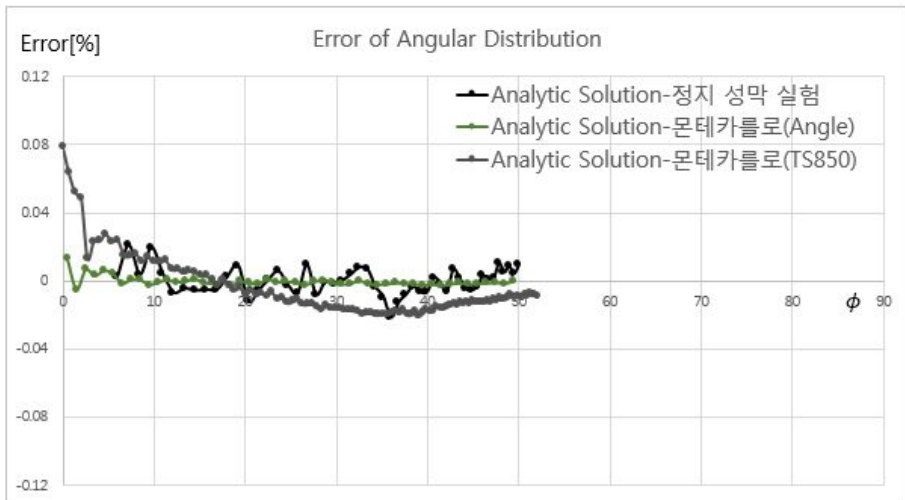


그림 5-32 해석적 해에 대한 방사특성 차이

그림 5-32 은 해석적 해에 대한 각각의 방사특성 차이값을 나타낸 그래프이다. 몬테카를로 시뮬레이션(Angle)의 방사특성은 해석적 해의 방사특성에 대해서 RMSE 기준 0.75%의 오차를 보이고, 정지 성막 실험의 방사특성과 몬테카를로 시뮬레이션(TS850)의 방사특성은 각각 RMSE 기준 1.51%, 3.39% 오차를 보였다.

각각의 RMSE 오차는 측정 위치의 방사특성값의 평균 대비 RMSE 값으로 계산하였다.

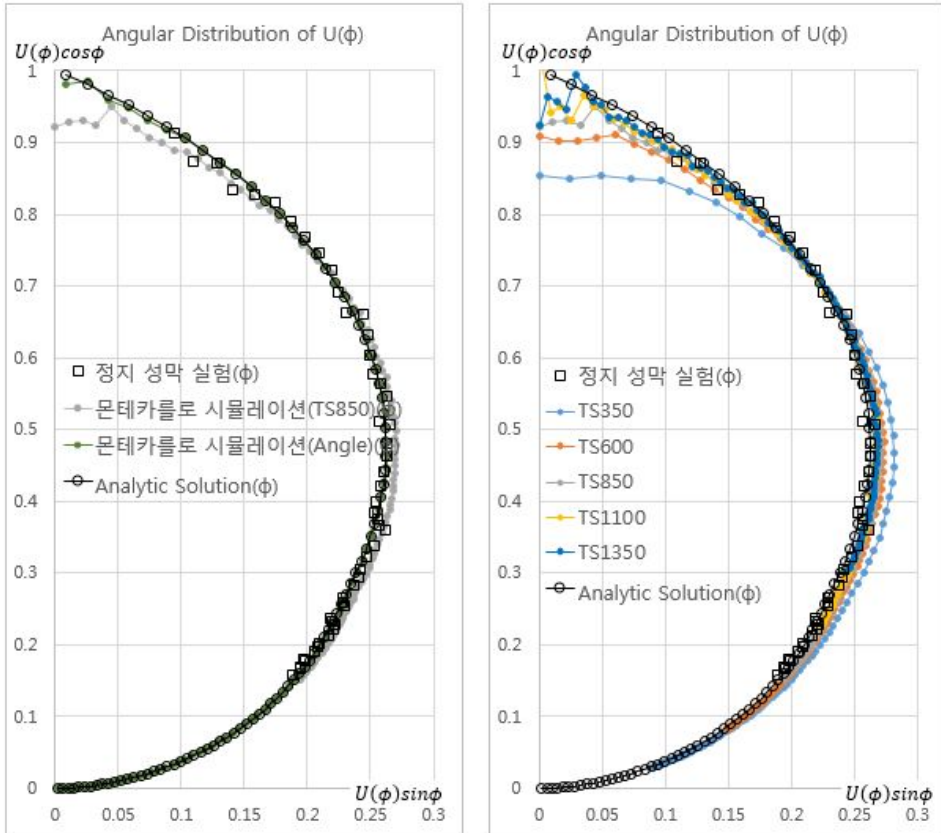


그림 5-33 정지 성막 실험의 방사특성 비교

다음 그림 5-33 은 노즐의 방사특성 차이를 다른 관점에서 볼 수 있도록 그림 5-31 의 방사특성을 다르게 표현한 그래프이다. CASE 1 의 그림 5-27 과 다르게 정지 성막 실험의 방사특성이 해석적 해의 방사특성과 거의 일치하는 것을 볼 수 있다. 또 다른 특이점은 노즐과 기관 사이 거리 변화에 따른 몬테카를로 시뮬레이션의 방사특성이 해석적 해의 방사특성에 더 빨리 수렴하는 것을 확인할 수 있었다. 또 그림 5-34 를 보면 CASE 1 의 경우보다 동일한 노즐-기관 사이 거리

조건에서 RMSE 값이 더 낮게 계산되었다. 이러한 원인은 방사각도 증가에 따른 CASE 2 의 노즐의 방사특성이 CASE 1 노즐의 방사특성보다 더 완만하게 변하기 때문인 것으로 생각된다.

이러한 특징은 제 3 장에서 구한 해석적 해의 방사특성 함수에서 노즐의 길이가 짧아질수록 임계각(Critical Angle)이 커지면서 노즐의 방사특성에서 노즐 입구에서 노즐 출구로 직접 통과하는 분자의 방사특성이 차지하는 비중이 커지면서 노즐의 방사특성 함수가 완만해지는 특징에서도 확인할 수 있다.

다음 그림 5-34 은 노즐과 기관 사이 거리에 따라서 해석적 해에 대한 몬테카를로 시뮬레이션 사이의 RMSE 를 나타낸 그래프이다. 거리가 멀어짐에 몬테카를로 시뮬레이션의 방사특성이 해석적 해에 수렴하는 것을 확인할 수 있다. CASE 1 의 노즐보다 더 빨리 수렴하는 것을 확인 할 수 있다.

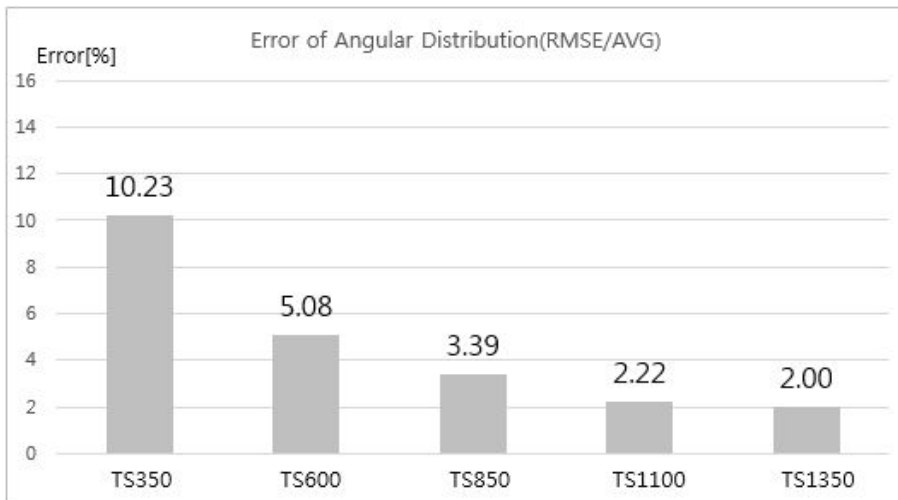


그림 5-34 해석적 해에 대한 방사특성 차이(RMSE/AVG)

제 6 장. 노즐의 방사특성 함수를 이용한 균일도 최적화

6.1 소스 기판 거리 및 옵셋 최적화

6.1.1 물질 소모에 따른 기판 균일도 변화

점 소스 방식의 소스 구조에서는 소스 사용시간이 증가함에 따라 소스 내부에 충전된 물질이 소모되기 때문에 노즐의 길이가 달라지는 효과가 발생한다. 5 장의 표 5-1 의 CASE 1, CASE 2 의 조건은 서로 다른 소스가 아닌 동일한 소스에서 물질 잔량의 차이에 따른 나타낸 표이다. 5 장에서 설명한것처럼 두 조건의 방사특성은 서로 다르다. 방사특성이 서로 다르기 때문에 기판 전체에 증착되는 물질의 형상도 달라지게 된다.

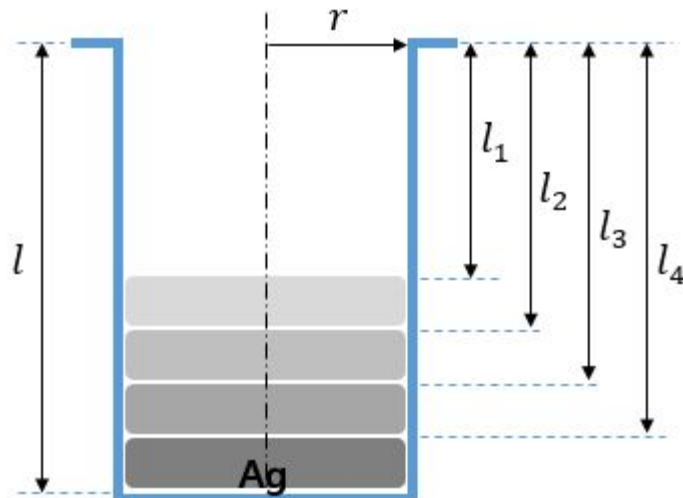


그림 6-1 물질 잔량에 따른 노즐 길이 변화

점 소스 방식의 소스는 이러한 방사특성의 변화에도 기판에서 일정한 수준 이하의 균일도를 만족하도록 소스 기판 거리와 옵셋(소스 기판 중심 수평거리)을 사용한다.

점 소스 방식의 소스 구조에서 균일도를 최적화하는 방법은 크게 두 가지 방법이 있다. 첫번째 방법으로 소스(노즐) 형상을 고정하고 소스 기관 거리와 읍셋을 최적화 하는 방법이다. 두번째 방법으로 소스 기관 거리와 읍셋을 고정하고 소스 형상을 최적화 하는 방법이다.

6.1.2 소스 기관 거리 및 읍셋 변화에 따른 균일도 변화

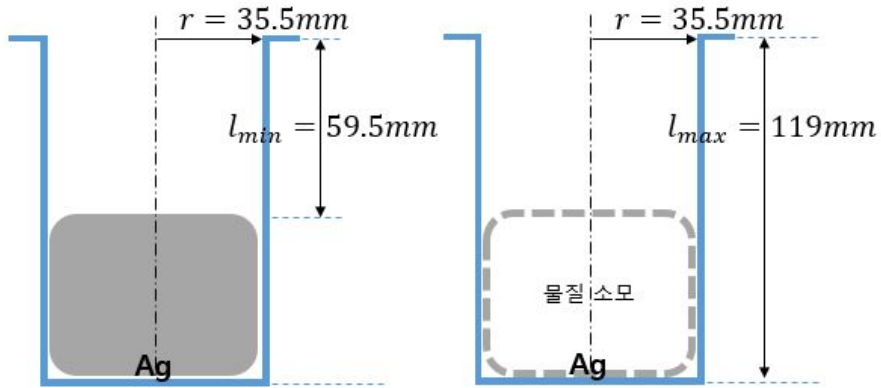


그림 6-2 물질 잔량에 따른 노즐 길이 변화

첫번째 방법인 소스 기관 거리와 읍셋을 최적화 하는 방법은 다음과 같다. 그림 6-2 는 5 장의 정지 성막 실험에서 사용한 소스의 형상이다. 이러한 형상의 소스 구조에서 물질을 50% 충전한 상태와 완전히 소모한 상태를 나타낸 그림이다. 실제 소스를 사용함에 따라 물질의 잔량이 줄어들고 노즐의 길이에 해당하는 L 이 변하게 된다. 그림 6-2 노즐의 경우 노즐의 반지름은 35.5mm 로 고정되어 있고, 노즐 길이는 50% 잔량 기준 59.5mm 이고 물질이 완전히 소모된 상태에서 노즐 길이는 119mm 가 된다.

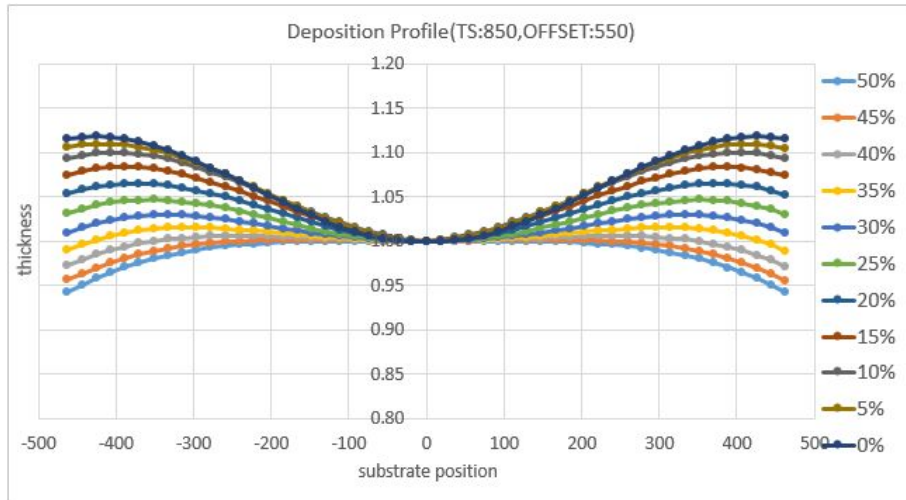


그림 6-3 물질 잔량에 따른 증착 형상

그림 6-3 은 소스 기관 거리가 850mm, 읍셋이 550mm 조건에서 물질 잔량이 50% ~ 0%일때에 925mm 크기의 기관에 증착된 물질의 증착 형상을 나타낸 그림이다. 방사특성은 3 장에서 구한 원통형 노즐의 방사특성에 해당하는 식 (3.24)와 식 (3.25)를 사용하였다.

물질 잔량이 줄어들면서 물질의 증착 형상이 달라지는 것을 확인할 수 있다.

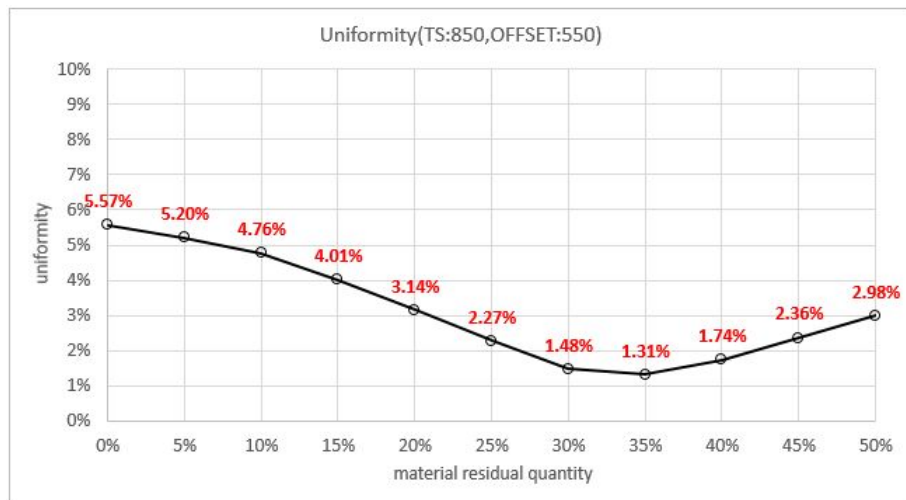


그림 6-4 물질 잔량에 따른 균일도 변화

그림 6-4 는 max-min 법으로 계산한 물질 잔량의 변화에 따른 각각의 균일도를 나타낸 그래프이다. 물질 잔량이 50%일때는 균일도가 2.98%고, 물질 잔량이 줄어들면서 잔량이 35%일때는 균일도가 1.31%로 좋아졌다가, 물질 잔량이 0%일때는 5.57%로 나빠졌다. 일반적으로 점 소스 구조의 균일도 성능은 전체 사용 구간에서 가장 나쁜 균일도를 기준으로 나타내기때문에, 위 조건에서 소스의 균일도 성능은 5.57%가 된다.

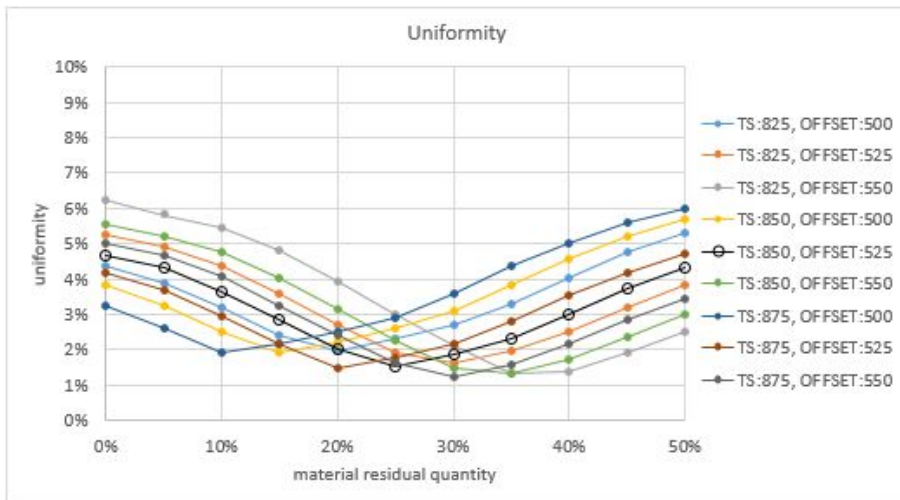


그림 6-5 소스 기관 거리와 오프셋에 따른 균일도 변화

그림 6-5 는 소스 기관 거리와 오프셋의 변화에 따른 균일도 변화를 나타낸 그래프이다. 모든 조건에서 시작 시작 균일도와 종료 균일도가 높고 중간 균일도가 낮게 계산되었다. 이는 최적값이 설정한 조건 안에 존재한다고 해석할 수 있다. 설정한 범위 밖에서는 물질 잔량 변화에 따라 균일도가 계속 감소하거나 계속 증가하는 경향을 보일것으로 예측할 수도 있다.

6.1.3 소스 기관 거리 및 오프셋 최적값

계산에 따르면 그림 6-2 의 노즐 형상인 반지름 35.5mm, 노즐 길이 119mm 인 소스에서는 소스 기관 거리 850mm, 오프셋 525mm 조건에서 소스의 균일도 성능이 4.68%로 가장 좋은 성능을 보였다.

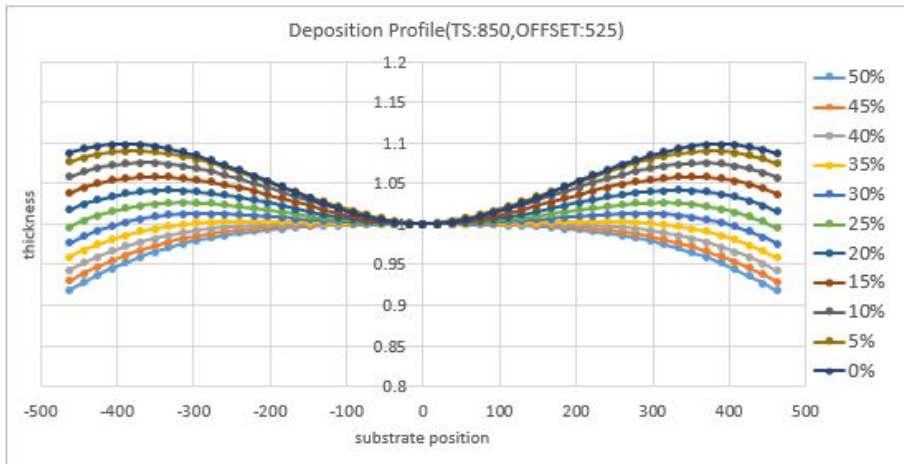


그림 6-6 물질 잔량에 따른 증착 형상

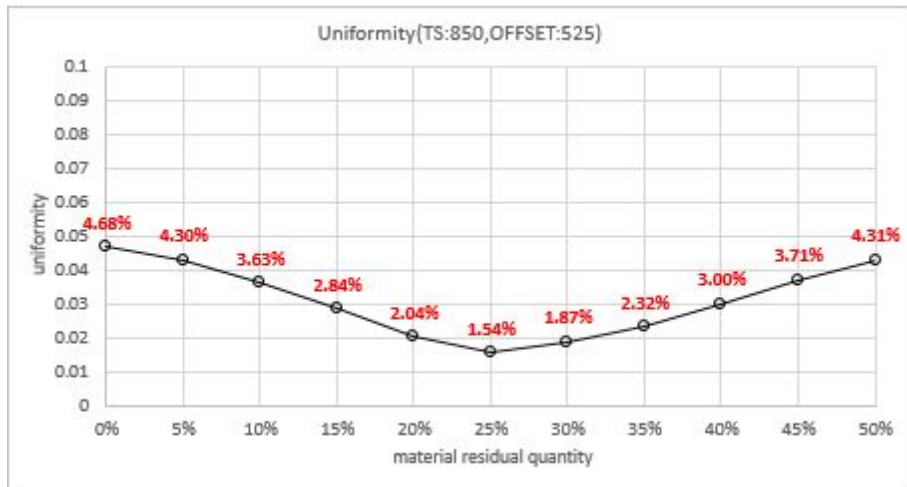


그림 6-7 물질 잔량에 따른 균일도 변화

6.2 소스의 형상 최적화

6.2.1 소스 형상 변화에 따른 기관 균일도 변화

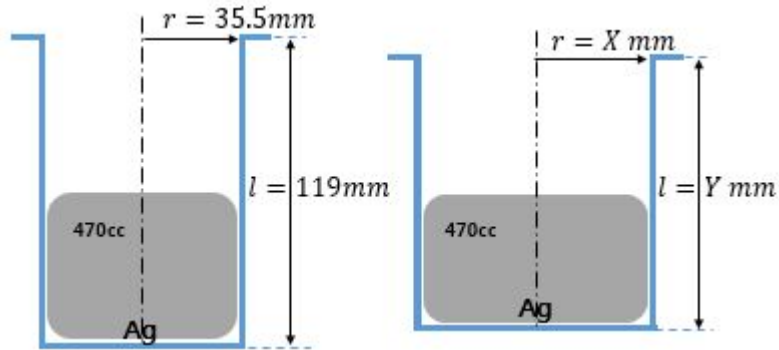


그림 6-8 노즐 형상 변화

점 소스 구조에서 기관의 균일도를 최적화 하는 두번째 방법으로 소스 기관 거리와 읍셋을 고정하고 소스의 형상을 최적화 하는 방법이다. 일반적으로 점 소스 장비를 제작하는 경우 소스 기관 거리와 읍셋이 가변적이지 않고 고정되어 있는 경우가 많다. 만약 장비를 이미 제작한 상태에서 기관의 균일도를 최적화 할 필요가 있는 경우 소스의 형상을 변경해서 균일도를 최적화 할 수 있다.

본 연구에서는 그림 6-8 에서 소스 용량에 해당하는 470cc 의 부피를 최대한 유지하면서 반지름과 소스 길이를 변경하면서 균일도 변화를 계산하였다. 그리고 소스 기관 거리는 850mm, 읍셋은 550mm 로 고정되어 있다고 가정하였다.

소스 최대 충전 물질량은 전체 부피의 50% 조건을 사용하였다.

6.2.2 소스 형상 변화에 따른 균일도 변화

R(mm)	34.5	35.5	36.5	37.5	38.5	39.5	40.5
L(mm)	126	119	112.5	106.5	101	96	91.5
Volume(cc)	471.1	471.1	470.9	470.5	470.3	470.6	471.5

표 6-1 노즐의 반지름과 길이에 따른 소스 부피

표 6-1 은 소스의 반지름을 증가시키면서 소스의 용량을 470cc 를 유지하기 위한 노즐 길이를 계산한 표이다. 앞에서 설명한것처럼 소스 기관 거리 850mm, 읍셋 550mm 를 유지한 상태에서 소스의 형상 변화에 따른 균일도 변화를 계산하였다. 방사특성은 3 장에서 구한 원통형 노즐의 방사특성에 해당하는 식 (3.24)와 식 (3.25)를 사용하였다.

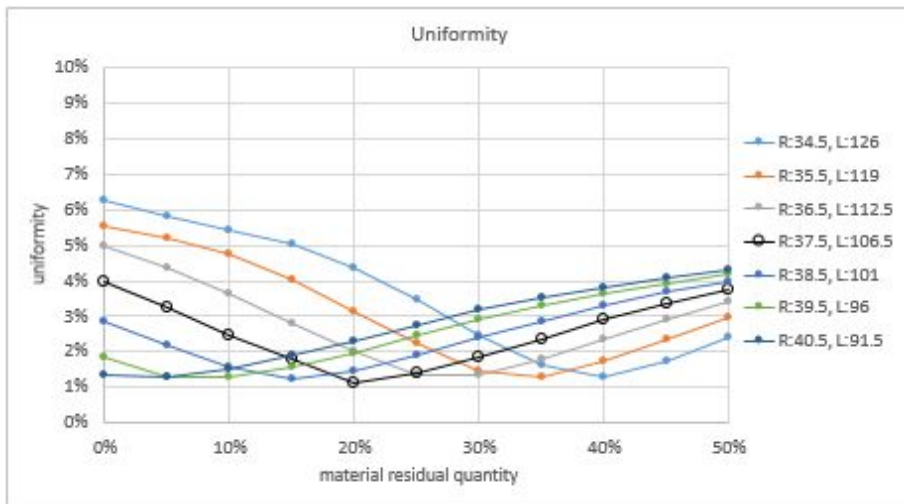


그림 6-9 소스 형상에 따른 균일도 변화

그림 6-8 은 소스 형상에 따른 균일도 변화를 나타낸 표이다. 물질 잔량이 50%인 조건에서 소스의 반지름이 커질수록 균일도가 나빠지는

것을 확인할 수 있었다. 반대로 소스의 반지름이 작아질 수록 균일도가 좋아지는 경향을 보였다. 하지만 소스의 반지름이 작아지는 경우 물질 잔량이 줄어들면서 균일도가 급격하게 나빠지는 경향을 보이는 것을 확인할 수 있었다. 앞에서 설명한것처럼 소스의 균일도 성능에 해당하는 전체 사용 구간에서 최대 균일도 값을 기준으로 생각하면 소스 반지름이 37.5mm, 길이가 106.5mm 인 소스 형상에서 균일도가 3.97%로 계산되었다.

6.2.3 소스 형상 최적값

다음은 소스 기관 거리 850mm, 읍셋 550mm 조건에서 노즐의 반지름 37.5mm, 노즐 길이 106.5mm 인 소스에서 물질 잔량에 따른 증착 형상 변화를 나타낸 그래프이다.

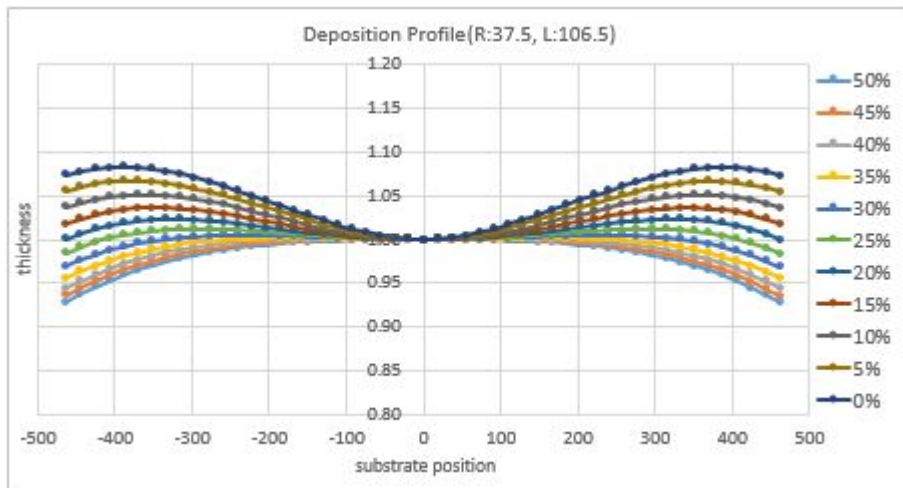


그림 6-10 물질 잔량에 따른 증착 형상

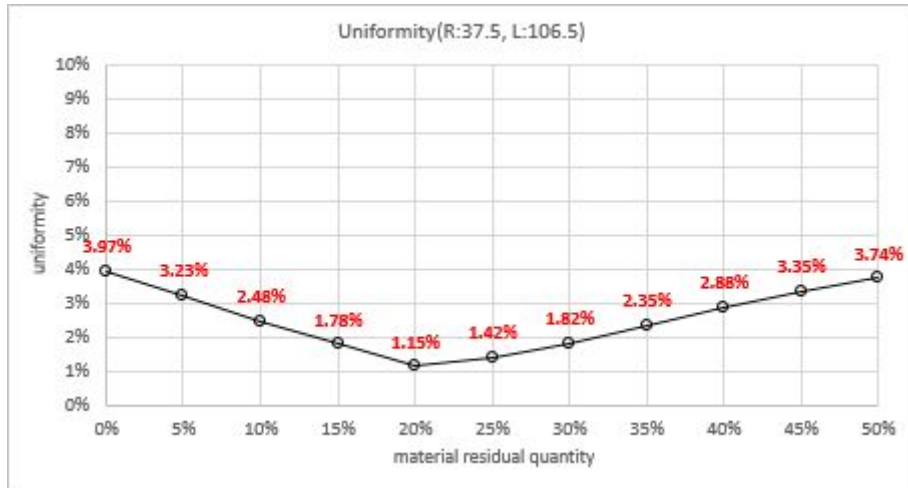


그림 6-11 물질 잔량에 따른 균일도 변화

그림 6-11 은 물질 잔량에 따른 균일도 변화를 나타낸 표이다. 소스 균일도 성능에 해당하는 최대 균일도는 3.97%이다. 이 수치는 6.1.2 에서 동일한 소스 기관 거리와 읍셋을 갖는 소스 반지름이 35.5m 인 노즐의 균일도 5.57%였던걸 생각하면, 소스의 형상 변화 만으로 균일도 1.60% 향상 효과를 얻을 수 있다는 것을 의미한다.

제 7 장. 결론

본 논문에서는 분자유동 조건에서 원통형 노즐과 원뿔형 노즐의 방사특성의 해석적 해를 구하는 방법에 대한 연구를 하였으며 그 결과를 몬테카를로 시뮬레이션과 실험을 통해 검증하였다. 그 결과는 다음과 같다.

(1) 노즐 출구 전체 면적에서 방출되는 분자를 노즐 출구 중심 한 점에서의 방출로 근사화함으로써 노즐의 방사특성을 해석적 해를 구할 수 있음을 보였다.

(2) 원통형 노즐에서 노즐의 반지름, 노즐의 길이 정보를 이용하여 노즐의 방사특성에 해당하는 해석적 해를 구하였다.

(3) 원뿔형 노즐에서 노즐 입구의 반지름, 노즐 출구의 반지름, 노즐 길이 정보를 이용하여 노즐의 방사특성을 계산할 수 있는 방법을 제시하였다.

(4) 본 연구를 통해 구한 원통형 노즐의 해석적 해와 몬테카를로 시뮬레이션의 결과가 평균 제곱근 오차(RMSE) 0.5% 이하로 일치함을 확인하였다.

(5) 본 연구를 통해 구한 원뿔형 노즐의 방사특성과 몬테카를로 시뮬레이션의 결과가 평균 제곱근 오차(RMSE) 2.1% 이하로 일치함을 확인하였다.

(6) 두가지 서로 다른 길이의 노즐에 대한 정지 성막 실험을 통해 해석적 해의 방사특성과 증착된 물질의 두께로 구한 방사특성이 RMSE 기준 4.93%, 1.51% 수준으로 일치함을 확인하였다.

(7) 본 연구를 통해 구한 원통형 노즐 방사특성의 해석적 해를 점 소스 구조에 적용하여 소스 기관 거리와 읍셋의 최적화, 소스 형상의 최적화에 활용할 수 있음을 보였다.

본 연구를 통해 원통형 노즐과 원뿔형 노즐의 방사특성을 구하기위해 수치적분법이나 몬테카를로 시뮬레이션을 수행하지 않고도 노즐의 방사특성을 근사화할 수 있는 방법을 제시하였다. 이는 노즐의 형상 변화에 따른 새로운 방사특성을 구하는 시간을 절약할 수 있고, 균일도 최적화 작업등을 빠르게 수행할 수 있을 것으로 기대한다.

참고문헌 (Bibliography)

- [1] K. Nanbu, "Angular distributions of molecular flux from orifices of various thickness," *Vacuum* **35**, 573-576 (1985).
- [2] K. Nanbu and Y. Watanabe, "Thickness distribution of films fabricated by the molecular beam epitaxy technique," *Vacuum* **36**, 349-354 (1986).
- [3] S. Jun, M. Kim, S. H. Kim, M. Y. Lee, and E. K. Lee, "A study on the evaporation process with multiple point-sources," *Electron. Mater. Lett.* **9**, 7-11 (2013).
- [4] Z. Shiwei, H. Jin, L. Kun, and W. Jichang, "Monte Carlo Simulation of Positional Beaming Effect of Molecular Flow in Straight Cylindrical Pipeline," *Vacuum Sci. Technol.* **26**, 295 (2006).
- [5] S. Zhang, G. Ji, and J. Han, "The Positional and Angular Distribution of Molecules Flowing through Cylindrical Tube in Free Molecular Flow," *Physics Procedia* **32**, 513-524 (2012).
- [6] S. Adamson and J. McGilp, "Measurement of gas flux distributions from single capillaries using a modified, UHV-compatible ion gauge, and comparison with theory," *Vacuum* **36**, 227-232 (1986).
- [7] E. Lee, "Simulation of the thin-film thickness distribution for an OLED thermal evaporation process," *Vacuum* **83**, 848-852 (2009).
- [8] M. Kim, S. Jun, S. Kim, M. Lee, and E. K. Lee, "Design optimization of a sublimation purifier via computer simulation," *Electron. Mater. Lett.* **9**, 17-22 (2013).
- [9] B. Mercier, "Conductance measurement of a conical tube and calculation of the pressure distribution," *J. Vac. Sci. Technol. A* **24**, 529-536 (2006).
- [10] J. Gomez-Goni and P. Lobo, "Comparison between Monte Carlo and analytical calculation of the conductance of cylindrical and conical tubes," *J. Vac. Sci. Technol. A* **21**, 1452-1457 (2003).
- [11] P. Clausing, "The flow of highly rarefied gases through tubes of arbitrary length," *J. Vac. Sci. Technol.* **8**, 636-646 (1971).
- [12] R. Cole, "Complementary variational principles for Knudsen flow rates,"

- IMA J. Appl. Math. **20**, 107-115 (1977).
- [13] C. M. Davies and C. Lucas, "The failure of theory to predict the density distribution of gas flowing through a tube under free molecular conditions," J. Phys. D Appl. Phys. **16**, 1 (1983).
- [14] B.-Y. Cao, "Non-Maxwell slippage induced by surface roughness for microscale gas flow: a molecular dynamics simulation," Mol. Phys. **105**, 1403-1410 (2007).
- [15] T.-i. Sawada, B. Y. Horie, and W. Sugiyama, "Diffuse scattering of gas molecules from conical surface roughness," Vacuum **47**, 795-797 (1996).
- [16] W. Sugiyama, T. Sawada, M. Yabuki, and Y. Chiba, "Effects of surface roughness on gas flow conductance in channels estimated by conical roughness model," Appl. Surf. Sci. **169**, 787-791 (2001).
- [17] F. Celestini and F. Mortessagne, "Cosine law at the atomic scale: Toward realistic simulations of Knudsen diffusion," Phys. Rev. E **77**, 021202 (2008).
- [18] J. I. Mun, "Study on the prediction of thermal evaporated thin film profile in Roll-To-Roll process by Virtual Collision Direct Simulation Monte Carlo," (Seoul National University, 2015).
- [19] T. Wada, "Particle behavior simulation in thermophoresis phenomena by direct simulation Monte Carlo method," J. Appl. Phys. **116**, 044502 (2014).
- [20] G. Bird, "Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows," (Clarendon Press, Oxford, 1994).
- [21] G. Bird, "Perception of numerical methods in rarefied gasdynamics," Progr. Astronaut. Aero. **117**, 211-226 (1989).
- [22] G. Bird, "Approach to translational equilibrium in a rigid sphere gas," Phys. Fluids **6**, 1518-1519 (1963).
- [23] T. Wada and N. Ueda, "The effect of carrier gas flow rate and source cell temperature on low pressure organic vapor phase deposition simulation by direct simulation Monte Carlo method," J. Appl. Phys. **113**, 154503 (2013).
- [24] C. Galitzine and I. D. Boyd, "An analysis of the convergence of the direct simulation Monte Carlo method," J. Comput. Phys. **289**, 196-223 (2015).
- [25] M. Y. Plotnikov and E. Shkarupa, "A combined approach to the estimation of statistical error of the direct simulation Monte Carlo method," Comp.

- Math. Math. Phys+. **55**, 1913-1925 (2015).
- [26] F. Sharipov and J. L. Strapasson, "Direct simulation Monte Carlo method for an arbitrary intermolecular potential," Phys. Fluids **24**, 011703 (2012).
- [27] L. Isnard and R. Arès, "Theoretical and experimental molecular beam angular distribution studies for gas injection in ultra-high vacuum," J. Cryst. Growth **311**, 1640-1645 (2009).
- [28] V. Levdansky, V. Leitsina, and H. Van Viet, "Spatial distribution of gas particles emerging from a nonisothermally heated cylindrical channel with heterogeneous processes on the surface," Int. J. Heat. Mass Tran. **39**, 1103-1110 (1996).
- [29] M. Ikegawa and J. Kobayashi, "Deposition profile simulation using the direct simulation Monte Carlo method," J. Electrochem. Soc. **136**, 2982-2986 (1989).
- [30] K. Koura and H. Matsumoto, "Variable soft sphere molecular model for air species," Phys. Fluids. A-Fluid. **4**, 1083-1085 (1992).
- [31] K. Koura and H. Matsumoto, "Variable soft sphere molecular model for inverse-power-law or Lennard-Jones potential," Phys. Fluids. A-Fluid. **3**, 2459-2465 (1991).

APPENDIX

A. 노즐 내부 벽면의 형상에 따른 방사특성 변화

A.1 시뮬레이션 설계

노즐 표면의 형상이 노즐의 방사특성에 미치는 영향을 확인해보기 위해 몬테카를로 시뮬레이션을 수행하였다. 시뮬레이션 모델은 표 5-1의 원통형 노즐 형상을 사용하고, 노즐 벽면에 위아래로 등각이 되도록 노즐 벽면 전체에 요철 형상을 배치하였다. 시뮬레이션 모델에서 요철의 높이가 존재하면 노즐의 컨덕턴스가 변할 수 있기 때문에 요철의 높이는 0으로 설정하고, 요철의 각도에 따라 분자의 반사 각도만 변경해주도록 설정하였다.

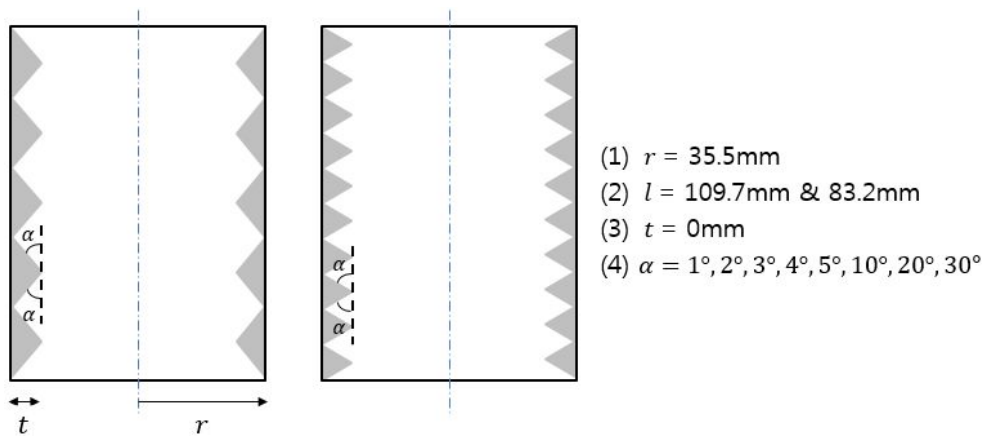


그림 A-1 노즐 벽면에 요철 형상 모델링

그림 A-1 과 같이 노즐 벽면에 가상의 요철 형상을 모델링하였고, 요철의 각도에 해당하는 α 는 1° , 2° , 3° , 4° , 5° , 10° , 20° , 30° 도 변경하면서 총 8x2 회의 시뮬레이션을 수행하였다.

A.2 시뮬레이션 결과

다음은 표 5-1 의 CASE 1 에 해당하는 노즐의 방사특성 시뮬레이션 결과이다. 노즐의 반지름인 35.5mm, 노즐의 길이는 109.7mm 이고 돌출부의 각도의 1° 에서 30° 까지 변경하면서 시뮬레이션을 수행하였다.

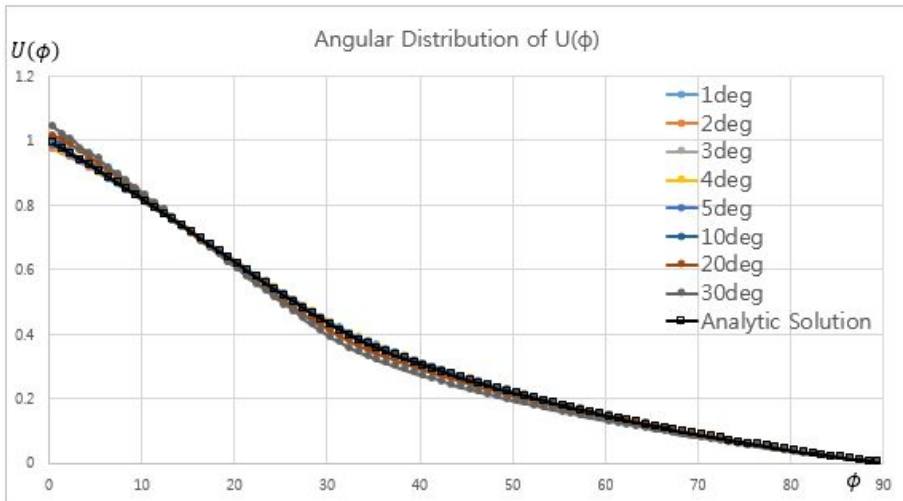


그림 A-2 CASE 1 노즐의 방사특성 시뮬레이션 결과

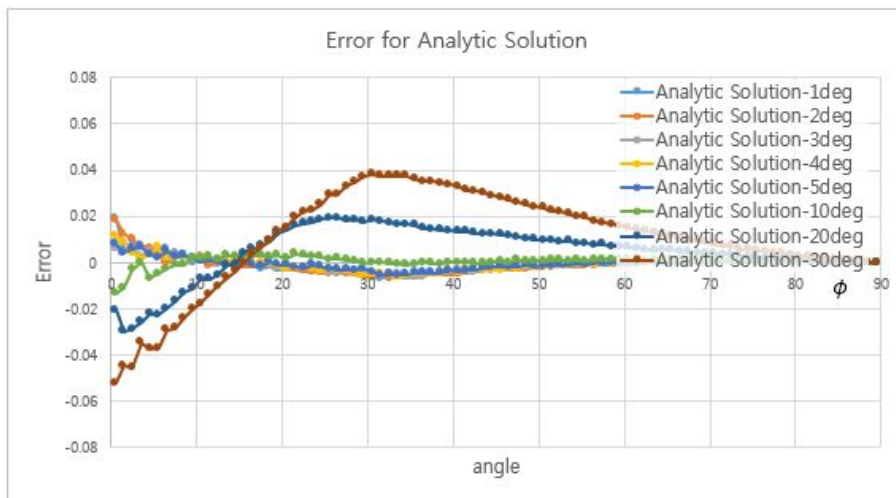


그림 A-3 CASE 1 노즐의 해석적 해에 대한 방사특성 차이

그림 A-2 는 요철이 있는 노즐의 방사특성 시뮬레이션 결과이다. Analytic Solution 이라고 표시된 선은 3 장에서 구한 식 (3.24)와 식 (3.25)를 이용해서 그린 해당 노즐의 방사특성 결과이다. 그래프를 보면 20° 와 30° 조건을 제외하면 거의 동일한 방사특성 결과를 보였다.

그림 A-3 는 각각의 방사특성의 차이를 더 명확하게 나타내기 위해서 해당 각도에서의 방사특성 값과 해석적 해의 방사특성 값의 차이값을 나타낸 그래프이다. 이 그래프에서도 20° 와 30° 조건을 제외하면 거의 일치하는 결과를 확인할 수 있었다.

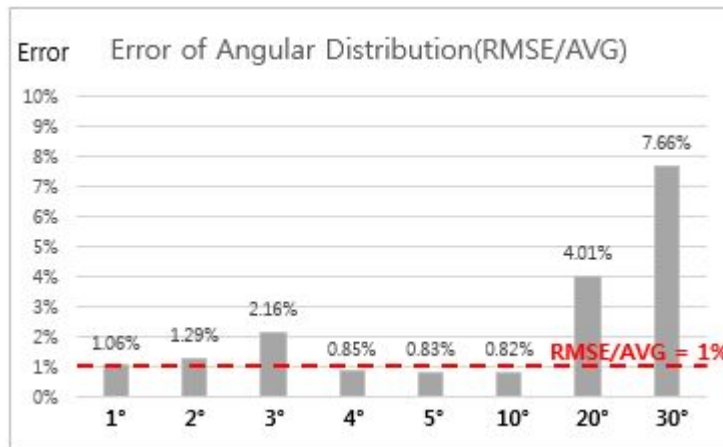


그림 A-4 CASE 1 노즐의 방사특성 RMSE 오차

그림 A-4 는 각각의 방사특성의 해석적 해에 대한 RMSE 오차를 나타낸 그래프이다.

다음은 표 5-1 의 CASE 2 에 해당하는 노즐의 방사특성 시뮬레이션 결과이다. 노즐의 반지름인 35.5mm, 노즐의 길이는 83.27mm 이다. CASE 1 노즐의 경우와 동일하게 돌출부의 각도의 1° 에서 30° 까지 변경하면서 시뮬레이션을 수행하였다.

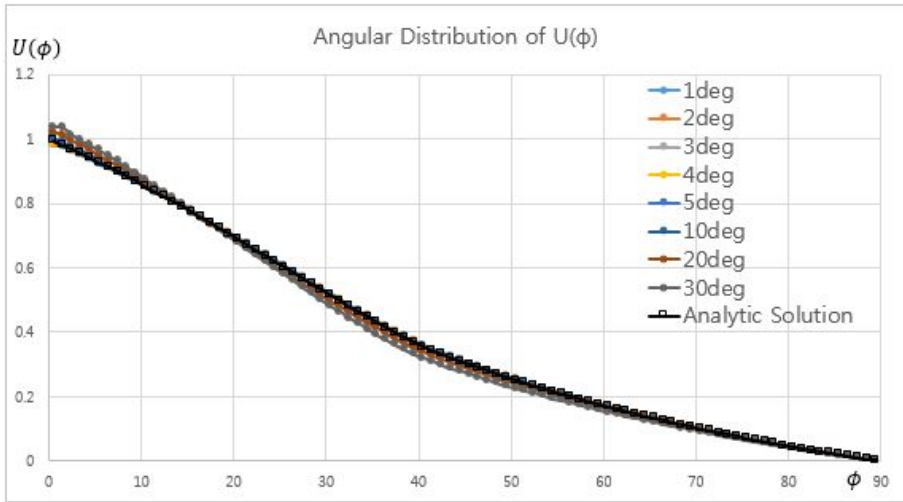


그림 A-5 CASE 2 노즐의 방사특성 시뮬레이션 결과

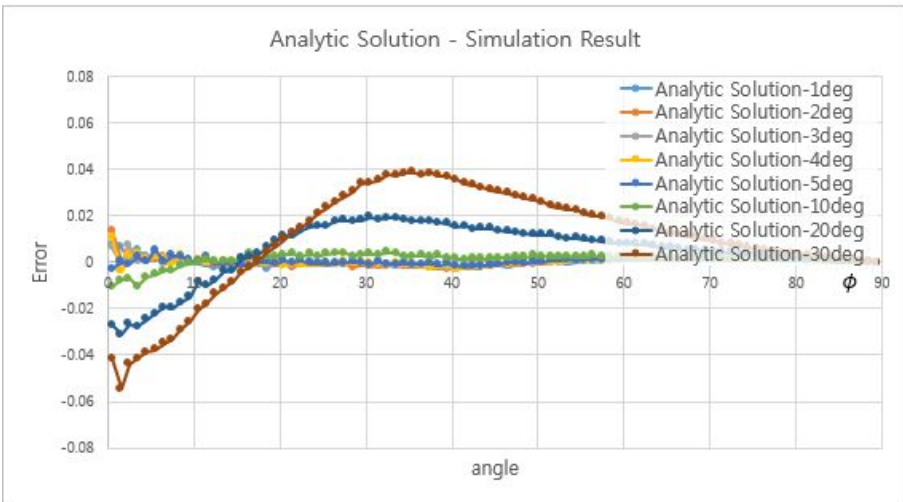


그림 A-6 CASE 2 노즐의 해석적 해에 대한 방사특성 차이

CASE 2 노즐의 경우도 CASE 1 노즐의 경우와 동일하게 20° 와 30° 조건을 제외하면 거의 동일한 방사특성 결과를 얻을 수 있었다.

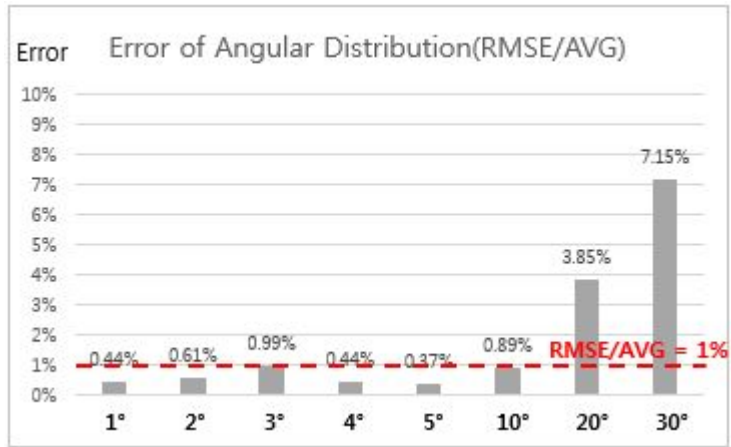


그림 A-7 CASE 2 노즐의 방사특성 RMSE 오차

그림 A-7 은 각각의 방사특성의 해석적 해에 대한 RMSE 오차를 나타낸 그래프이다.

A.3 분석

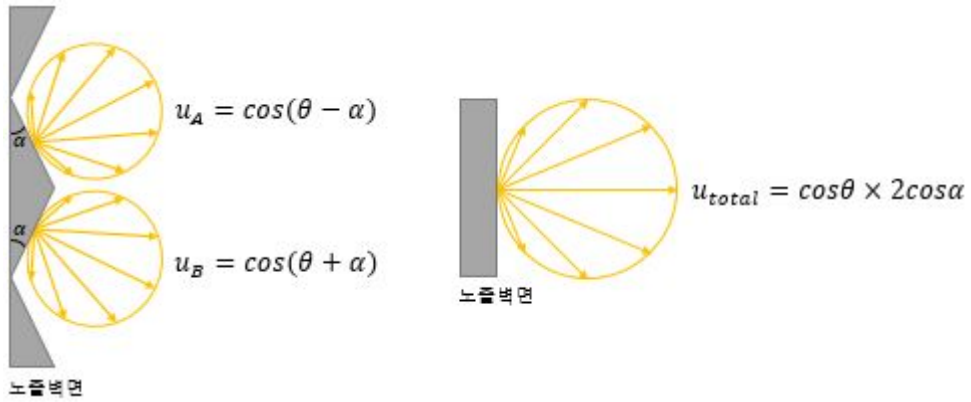


그림 A-8 노즐 벽면 요철부에서의 방사특성 변화

그림 A-8 의 왼쪽 그림은 노즐 벽면에 α 만큼 기울어진 요철과, $-\alpha$ 만큼 기울어진 요철이 있는 경우 벽면에서 반사되는 분자의 방사특성 변화를 나타낸 그림이다. U_A 처럼 노즐 벽면이 반시계방향으로 α 만큼 기울어있는 경우 해당 위치에서 방사특성은 $\cos(\theta - \alpha)$ 로 나타낼 수 있다. 다음으로 U_B 처럼 노즐 벽면이 시계방향으로 α 만큼 기울어있는 경우 해당 위치에서 방사특성은 $\cos(\theta + \alpha)$ 로 나타낼 수 있다.

이 두 방사특성의 더해져서 만드는 방사특성은 다음과 같이 계산할 수 있다.

$$\begin{aligned}
 u_{total} &= u_A + u_B \\
 &= \cos(\theta - \alpha) + \cos(\theta + \alpha) \\
 &= (\cos\theta\cos\alpha - \sin\theta\sin\alpha) + (\cos\theta\cos\alpha + \sin\theta\sin\alpha) \\
 &= \cos\theta \times 2\cos\alpha
 \end{aligned}$$

즉 요철이 없는 수직한 벽면이 만드는 방사특성에 해당하는 $\cos\theta$ 와

동일해진다. 이러한 계산에 의해서 작은 각도로 기울어진 노즐의 벽면의 요철 형상은 노즐 전체의 방사특성에 거의 영향을 주지 않는것으로 생각된다.

시뮬레이션에서 비교적 큰 각도인 20° 와 30° 의 경우 노즐의 방사특성이 다소 크게 변하는 원인은 기울어진 벽면의해서 반사된 분자 중 벽면쪽으로 반사된 분자는 벽면에 반사되면서 새로운 방사특성을 갖기 때문이다. 이러한 분자들에 의해서 노즐 전체의 방사특성이 변하게 된다.

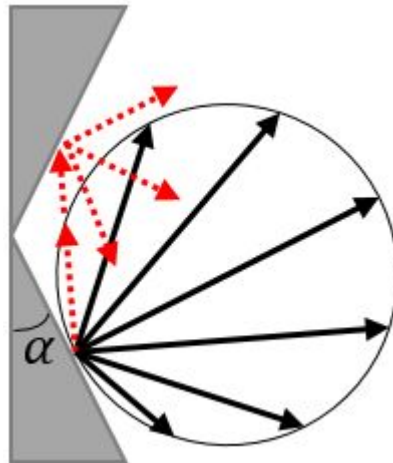


그림 A-9 벽면쪽으로 반사된 분자

Abstract

Angular Distribution of Molecular flow from Nozzles in Thermal Evaporation Process

Lee, Myungsun

School of Mechanical and Aerospace Engineering

The Graduate School

Seoul National University

The linear source of thermal evaporation type industrially used in manufacture process of semi-conductor or OLED, consists of crucible to contain materials, nozzle which sublimated of evaporated materials in heated crucible exit from. When the particle from nozzle is deposited on substrate, the thickness of deposited material depends on angular distribution of particle from nozzle.

According to Cosine Law of Knudsen, the distribution of particle from nozzle of thin orifice shape is the form of function of cosine, and the distribution of particle from cylindrical nozzle with height is the form of exponential function of cosine.

Angular distribution of particle from real nozzle, however, doesn't match the form of exponential function of cosine. So numerous theoretical methods have been researched to physically, mathematically express an angular distribution of particle so far.

One of representative methods is to integrate distribution of directly exit particle and distribution of reflected particle in wall of nozzle, using numerical integration. Another method is direct simulation of particle from nozzle by monte carlo method. These existing methods could have exact solution, but these need repetitive same calculation whenever shape of nozzle is changed, because analytical solution cannot be acquired.

In this paper, analytical solution exactly modeling angular

distribution by approximation in case of cylindrical and conical shaped nozzle commonly used, is deducted. This solution is verified by comparing real deposition experiment and method of DSMC(Direct Simulation of Monte Carlo)

... ..

keywords: Thermal Evaporation, Nozzle, Angular Distribution, Molecular flow, Monte Carlo Simulation, Cylindrical Nozzle, Conical Nozzle

Student Number : 2005-23448