

DOI: 10.70993/TCDN.2026.4(28).95-100

TÍNH TOÁN CÁC HỆ SỐ CHUYỂN ĐỘNG ELECTRON CỦA HỖN HỢP KHÍ CF₄-Kr

Phan Thị Tươi^{*1}, Phan Bích Ngọc¹, Nguyễn Vũ Thắng²

Ngày nhận bài: 20/12/2026; Gửi phản biện: 05/01/2026; Duyệt đăng: 15/01/2026

Tóm tắt: Bài báo trình bày việc tính toán và phân tích các hệ số chuyển động electron của hỗn hợp khí carbon tetrafluoride (CF₄) và krypton (Kr) bằng chương trình BOLSIG+. Các tham số được tính toán gồm: năng lượng trung bình của electron, độ linh động, hệ số khuếch tán với nhiều tỉ lệ trộn khác nhau. Kết quả giúp làm rõ sự phụ thuộc của các tham số chuyển động electron theo E/N, đồng thời cung cấp dữ liệu phục vụ các ứng dụng plasma và lắng đọng màng mỏng.

Từ khóa: phương trình Boltzmann; hỗn hợp khí CF₄-Kr; BOLSIG+; hàm phân bố năng lượng electron (EEDF); độ linh động; hệ số khuếch tán

Abstract: This paper presents calculations and analyses of electron transport coefficients in carbon tetrafluoride (CF₄), krypton (Kr) gas mixtures using the BOLSIG+ program. The computed parameters include the mean electron energy, the mobility μ_N , the diffusion coefficient D_N , for various mixing ratios. The results clarify how these electron transport parameters depend on E/N and provide data useful for plasma applications and thin-film deposition.

Keywords: The Boltzmann equation; CF₄-Kr gas mixture, BOLSIG+; electron energy distribution function (EEDF), the mobility, the diffusion coefficient.

1. Giới thiệu

CF₄ là một loại khí nhân tạo đóng vai trò quan trọng trong các ứng dụng công nghiệp như chất bán dẫn, khắc plasma cho quá trình xử lý vật liệu, công tắc mở phóng điện, vật lý và hóa học khí quyển, chất khí điện môi và công nghệ dò khí (Proshina, O.V et al., 2015). CF₄ được kết hợp với oxy làm môi trường khắc được sử dụng trong ngành công nghiệp bán dẫn để khắc các vật liệu điện môi, chẳng hạn như SiO₂ và cũng để lắng đọng màng polymer flo hóa. Khi kết hợp, CF₄ với SF₆ tạo ra một chất lỏng đông lạnh ít tốn kém, độc hại và ăn mòn hơn so với SF₆ đơn thuần (Reinking, G.F et al., 1986). CF₄ đã được sử dụng không chỉ ở dạng tinh khiết mà còn ở dạng hỗn hợp với các khí khác nhau cho nhiều ứng dụng công nghiệp. Trong công nghệ điện áp cao, CF₄ được sử dụng làm chất phụ gia cho các thiết bị ngắt mạch (Duzkaya, H et al., 2017). Hỗn hợp khí CF₄ và Ar được sử dụng trong các ứng dụng vi mạch điện tử trong khi đó, hỗn hợp CF₄/Ar cũng đã được sử dụng trong ứng dụng plasma ghép nối điện dung (Kurihara, M et al., 2000). Trong bài báo này, tính toán các hệ số chuyển động electron của hỗn hợp khí CF₄-Kr chúng được tính toán và phân tích bằng cách sử dụng phương trình xấp xỉ bậc hai Boltzmann trong phạm vi E/N thay đổi từ 10 đến 1000 Td (1 Td = 1017 V·cm²), trong đó E là điện trường và N là số mật độ hạt.

^{1,2} Trường Đại học Sư phạm Kỹ thuật Hưng Yên; Email: vutruongspdt@gmail.com

³ Trường THPT Chuyên Hà Nội Amsterdam; Email: hoanglongbanh@gmail.com

2. Cơ sở lý thuyết

2.1. Các hệ số chuyển động electron

Phần mềm BOLSIG⁺ do Hagelaar và Pitchford (2005) nghiên cứu và được sử dụng rộng rãi trong vật lý kỹ thuật plasma để tính toán các hệ số chuyển động electron trong khí nguyên chất hoặc hỗn hợp khí, như độ linh động, hệ số khuếch tán và năng lượng trung bình. Cơ sở của BOLSIG⁺ là nghiệm phương trình Boltzmann với xấp xỉ bậc hai (two-term approximation). Trong bài toán này, hàm phân bố năng lượng electron (EEDF) $f(\varepsilon)$ được xác định bằng cách giải phương trình Boltzmann (Hagelaar & Pitchford, 2005).

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f - \frac{e}{m} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = C[f] \quad (1)$$

Trong đó $\mathbf{v}$ là vector vận tốc electron, E là điện trường; $C[f]$ biểu thị các thay đổi do va chạm electron (Hagelaar & Pitchford, 2005) e là điện tích electron và m là khối lượng electron. Vì việc giải trực tiếp phương trình Boltzmann là phức tạp, các nhà khoa học đã triển khai hàm phân bố trong hệ tọa độ cầu và sử dụng xấp xỉ bậc hai của phương trình Boltzmann để đơn giản hóa bài toán. Khi đó, hàm phân bố $f^{(\mathbf{v}, t, z, \cos \theta)}$ có thể được mở rộng như sau:

$$f(\mathbf{v}, t, z, \cos \theta) \approx f_0(\mathbf{v}, t, z) + f_1(\mathbf{v}, t, z) \cos \theta \quad (2)$$

Ở đây, θ biểu thị góc giữa vector vận tốc electron và hướng của điện trường; f_0 và f_1 lần lượt là các thành phần đẳng hướng và dị hướng của hàm phân bố. Giải phương trình (2) cho phép xác định các tham số vận chuyển electron khác nhau (Hagelaar & Pitchford, 2005).

Năng lượng trung bình $\langle \varepsilon \rangle$ (eV):

$$\langle \varepsilon \rangle = \int_0^{\infty} \varepsilon^{3/2} f_0 d\varepsilon \quad (3)$$

Độ linh động (m/V/s):

$$\langle \mu N \rangle = -\frac{\gamma}{3} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon}{Q} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\varepsilon \quad (4)$$

Hệ số khuếch tán (1/m/s):

$$D_N = \frac{\gamma}{3} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon}{Q} f_0 d\varepsilon \quad (5)$$

Ở đây, f_0 là phần đẳng hướng của EEDF và được chuẩn hóa bởi:

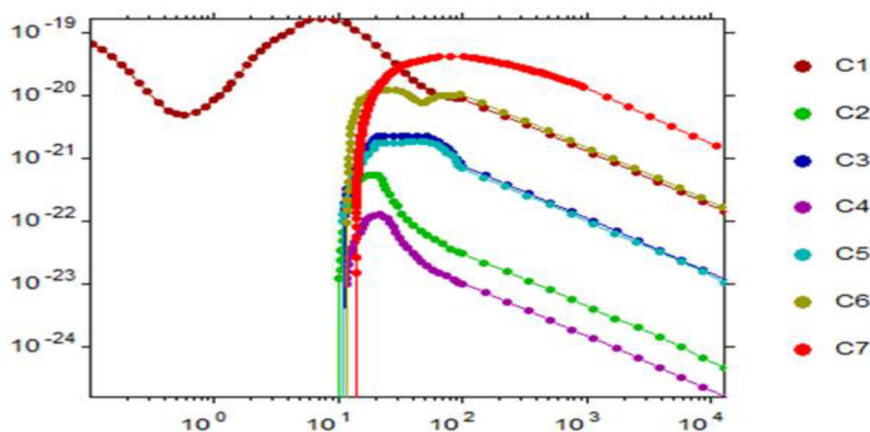
$$\int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} F_0 d\varepsilon = 1 \quad (6)$$

N là mật độ khí, Q là tiết diện truyền động lượng hiệu dụng của electron, γ là một hằng số, và ε là năng lượng của electron tính bằng electron volt (eV).

2.2. Tiết diện va chạm electron

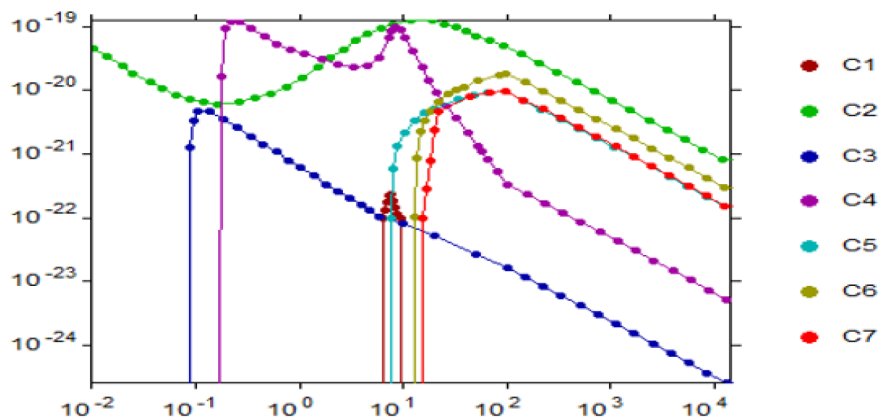
BOLSIG⁺ là một công cụ phần mềm miễn phí (Hagelaar & Pitchford, 2005) được sử dụng để tính toán các hệ số chuyển động electron, và đã được áp dụng cho nhiều loại khí nguyên chất và hỗn hợp khí, chẳng hạn như $\text{CF}_4 - \text{SF}_6$ (Liu & Xiao, 2007), $\text{CF}_4\text{-Ar}$ (Tezcan, et al., 2013) $\text{CF}_4\text{-N}_2$ (Phạm Xuân Hiền, & Đỗ Anh Tuấn, 2020). Do đó, một bước quan trọng trong việc tính toán các hệ số chuyển động electron là lựa chọn bộ tiết diện va chạm electron đáng tin cậy cho hỗn hợp khí. Các bộ tiết diện của nguyên tử Kr được kế thừa từ bộ dữ liệu do Hayashi công bố (1982) thể hiện ở Hình 1, bao gồm: 1 tiết diện kết hợp (C1), các tiết diện kích thích (C2–C6) và tiết diện ion hóa (C7). Các tiết diện của phân tử CF_4 được kế thừa từ nghiên cứu của Hayashi và Nakamura (1998) ở Hình 2, gồm: 1 tiết diện kết hợp (C1), tiết diện đàn hồi (C2), các tiết diện kích thích (C3–C6) và tiết diện ion hóa (C7).

Hình 1. Tiết diện va chạm electron của Kr



Nguồn: (Hayashi, 1982).

Hình 2. Tiết diện va chạm electron của CF_4

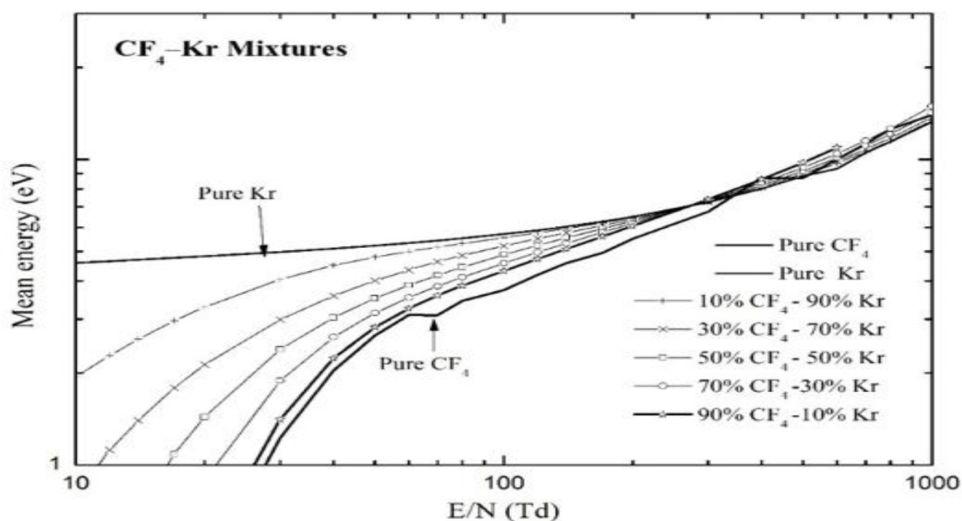


Nguồn: (Hayashi & Nakamura, 1998).

3. Kết quả

Hàm phân bố năng lượng electron (EEDF) và các hệ số chuyển động electron của hỗn hợp khí CF₄-Kr được tính toán bằng cách sử dụng phương trình xấp xỉ bậc hai Boltzmann dùng chương trình BOLSIG⁺ để tính toán trong khoảng 10–1000 Td, tại áp suất 1 Torr và nhiệt độ 300K.

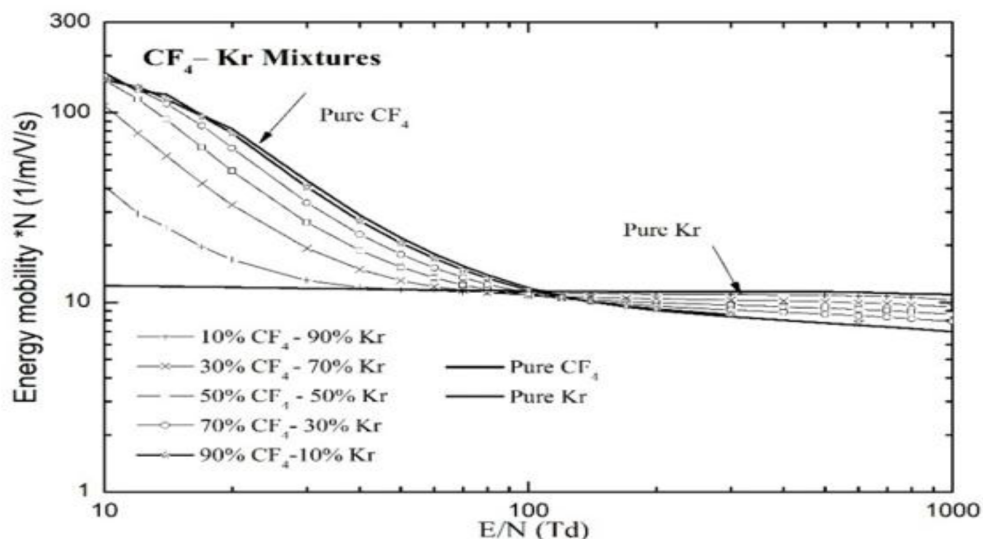
Hình 3. Năng lượng trung bình của hỗn hợp khí CF₄-Kr



Nguồn: Kết quả nghiên cứu của nhóm tác giả.

Hình 3 thể hiện năng lượng trung bình của hỗn hợp khí CF₄ -Kr theo tỉ lệ của E/N ở các nồng độ khác nhau. Kết quả cho thấy sự biến thiên năng lượng trung bình electron (ϵ) (eV) theo điện trường giảm chuẩn hoá E/N (Td) của khí CF₄ nguyên chất và, khí Kr nguyên chất và các hỗn hợp CF₄-Kr với các tỷ phần (10/90, 30/70, 50/50, 70/30, 90/10) trong dải E/N = 10:1000 Td.

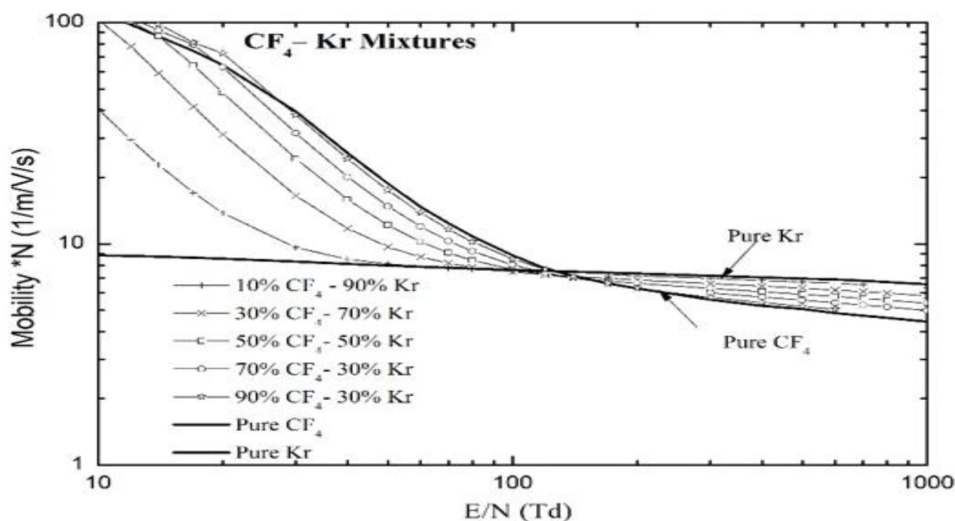
Hình 4. Hệ số năng lượng linh động của hỗn hợp khí CF₄-Kr



Nguồn: Kết quả nghiên cứu của nhóm tác giả.

Hình 4 thể hiện hệ số năng lượng linh động của hỗn hợp khí CF_4 -Kr kết quả cho thấy năng lượng linh động giảm rõ rệt khi E/N tăng trong vùng 10 Td–100 Td. Ở E/N thấp, tăng tỷ phần trăm Kr làm năng lượng linh động đáng kể các đường cong dịch xuống, trong khi Kr nguyên chất gần như ổn định quanh vùng 10Td. Khi $E/N \geq 100$ Td, các đường cong hội tụ cho thấy đặc tính chuyển động năng lượng của electron chủ yếu bị chi phối bởi E/N ở vùng điện trường cao.

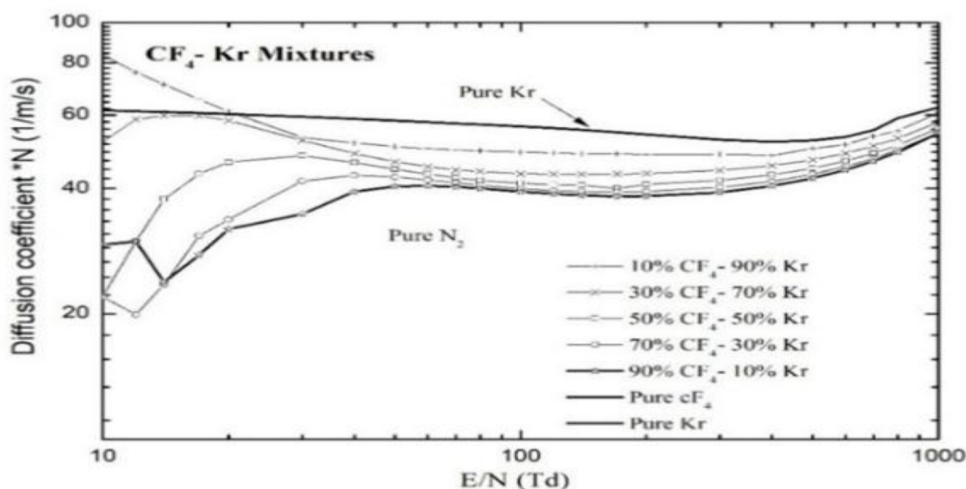
Hình 5. Hệ số linh động của hỗn hợp khí CF_4 -Kr



Nguồn: Kết quả nghiên cứu của nhóm tác giả.

Đồ thị hình 5 cho thấy hệ số linh động electron của trong hỗn hợp CF_4 -Kr giảm mạnh khi E/N tăng trong vùng 10–100 Td, đặc biệt với hỗn hợp khí có tỉ lệ CF_4 cao. Khí Kr nguyên chất thấp và gần như ít biến thiên ở E/N thấp.

Hình 6. Hệ số khuếch tán của hỗn hợp khí CF_4 -Kr



Nguồn: Kết quả nghiên cứu của nhóm tác giả.

Đồ thị cho thấy hệ số khuếch tán electron trong hỗn hợp khí CF₄-Kr phụ thuộc mạnh vào E/N ở vùng thấp (E/N=10–30 Td), trong đó một số thành phần có tỉ lệ CF₄ xuất hiện cực tiểu rõ rệt trước khi tăng lên. Khi E/N tăng đến khoảng 50–300 Td, các đường cong tiệm cận và tạo vùng gần như bão hoà/giảm nhẹ, với hệ số khuếch tán cao hơn đối với hỗn hợp khí Kr nguyên chất có tỉ lệ cao hơn.

4. Kết luận

Trong nghiên cứu này, các hệ số chuyển động electron như độ linh động, hệ số khuếch tán và năng lượng trung bình được tính toán với các tỷ lệ trộn khác nhau của hỗn hợp khí CF₄-Kr bằng phần mềm BOLSIG+. Khi tính toán các hệ số chuyển động electron sử dụng dữ liệu các bộ tiết diện va chạm electron CF₄, Kr đã được kiểm chứng trước đó. Do đó, các đặc tính của các hệ số chuyển động electron thu được của hỗn hợp CF₄-Kr đóng vai trò là dữ liệu đầu vào có giá trị cho nhiều ứng dụng, đặc biệt là để mô phỏng các quá trình plasma ghép nối cảm ứng CF₄-Kr được sử dụng trong khắc silicon

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Proshina, O.V., Rakhimova, T.V., Lopaev, D.V., Samara, V., Baklanov, M.R., and de Marneff, J.F., 2015. Experimental and theoretical study of RF capacitively coupled plasma in Ar-CF₄-CF₃I mixtures. *Plasma Sources Science and Technology*, 25, p.055006.
2. Reinking, G.F., Christophorou, L.G., and Hunter, S.R., 1986. Studies of total ionization in gases/mixtures of interest to pulsed power applications. *Journal Applied Physics*, 60(2), pp.499-508.
3. Duzkaya, H., and Tezcan, S.S., 2017. Measurement and calculation of breakdown voltage in CF₄ gas mixtures. *Gazi Üniversitesi Journal Science Part C*, 5(3), pp.185-195. Cox, et al., 1989),
4. Kurihara, M., Petrovic, Z.L., and Makabe, T., 2000. Transport coefficients and scattering cross-sections for plasma modeling in CF₄-Ar mixtures: A swarm analysis. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 33(7), pp.2146-2153.
5. Hagelaar G J M and Pitchford L C, 2005 “Solving the Boltzmann equation to obtain electron transport coefficients and rate coefficients for fluid models” *Plasma Sources Sci. Technol.* 14 722–733
6. Liu, X., and Xiao, D., 2007. Monte Carlo simulation of electron swarm parameters in the SF₆/CF₄ gas mixtures. *The Japan Society of Applied Physics*. 46(4A), pp.1664-1667.
7. Tezcan, S.S., Dincer, M.S., Bektas, S., and Hiziroglu, H.R., 2013. Boltzmann analysis of electron swarm parameters in binary CF₄+Ar mixtures. *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation*, 20(1), pp.98-103.
8. Pham Xuan Hien and Do Anh Tuan, “Các hệ số chuyển động electron và giới hạn cường độ điện trường trong hỗn hợp khí CF₄-N₂“, *Tạp chí Khoa học và Công nghệ Năng lượng (Trường Đại học Điện lực)*, số 23, pp. 24-29, 2020 (ISSN: 1859 – 4557)
9. Hayashi M J. *Phys. D*. 15 1418 (1982)
10. Hayashi Y and Nakamura Y, Electron Collision Cross Sections for the CF₄ Molecule by Electron Swarm Study, International Conference on Atomic and Molecular Data and Their Applications, edited by Wiese W L and Mohr P J, NIST Special Publication, no. 926, pp. 248–251, 1998.