

2항근사 볼츠만 방정식을 이용한 CO₂분자가스의 전자수송계수의 해석

The study of electron transport coefficients in pure CO₂ by 2-term approximation of the Boltzmann equation

전 병훈*, 김 지연*, 김 송강**

(Byung-Hoon Jeon*, Ji-Yeon Kim* and Song-Gang Kim**)

Abstract

The electron transport coefficients, the electron drift velocity W , the longitudinal diffusion coefficient ND_L and D_L/μ , in pure CO₂ were calculated over the wide E/N range from 0.01 to 500 Td at 1 Torr by two-term approximation of the Boltzmann equation for determination of electron collision cross sections set and for quantitative characteristic analysis of CO₂ molecular gas. And for propriety of two-term approximation of Boltzmann equation analysis, the calculated results compared with the electron transport coefficients measured by Nakamura.

Key Words : Electron drift velocity, Longitudinal diffusion coefficient, Electron transport coefficient, CO₂ molecular gas, Two-term approximation of the Boltzmann equation

1. 서론

가스분자가 가지고 있는 전자충돌단면적의 정확한 데이터를 구하는 방법 중 본 연구에서 이용되는 전자군 방법(Electron Swarm Method)은 낮은 에너지 범위에 존재하는 목적 기체분자의 정확한 (진동)여기단면적을 결정하는 방법으로서 회가스와 혼합가스와 순수가스상태에서의 전자기동속도, 종축확산계수, 전리계수, 부착계수 등의 전자수송계수를 측정하

고, 이들 계수들을 볼츠만 방정식 해법이나 몬테카를로 시뮬레이션 기법을 이용한 계산결과와의 비교를 통하여 목적으로 삼고 있는 기체분자의 정확한 전자충돌단면적을 결정하는 것이다. 그리고 전자수송계수의 시뮬레이션 기법을 통한 분자가스의 물성적 해석의 초기 연구는 Itoh[1], Mushaf[2], Thomas[3]에 의해 연구되었는데 이것은 방전 공간 내에서 나타나 는 전체의 전자를 추적하여 전자기동속도 등 전자수송계수의 동향을 조사하여 이들 전자의 물리량을 가상적으로 샘플링(Sampling)하고 그들 하전입자의 운동을 전자계산기로 계산하여 그 특성을 확률적으로 결정하여 해석하였다.

본 연구에 이용되고 있는 CO₂분자가스는 지구의 온난화 현상을 일으키고, 스모그 및 산성비의 원인

* 중부대학교 컴퓨터응용설계학과
(충남 금산군 추부면 마전리 산2-25)

Fax : 041-750-6655

E-mail : bhjeon@joongbu.ac.kr

** 중부대학교 정보통신공학과

이 되고 있는 가스중 하나[4]이며, 본 논문에서는 전자군 방법을 이용하여 CO₂분자가스의 정확한 전자 충돌단면적의 결정과 순수 CO₂분자가스에서의 전자 수송계수의 정확한 물성적 해석을 통하여 이러한 환경오염물질의 제거와 분해를 위한 방안 점을 찾고자 하는 것이다. 따라서 본 논문에서는 0.01~500 Td에 이르는 광범위한 E/N 범위에서 전자기동속도와 종축확산계수를 2항근사 볼츠만 방정식을 이용하여 계산하고 측정된 결과와 비교하고 있다.

2. 2항근사 볼츠만방정식 해석

기체 중에서 하전입자군의 수송계수를 측정하는 방법에는 2항근사와 다항근사 볼츠만 방정식 해법과 몬테칼로 시뮬레이션 기법과 같이 3가지 방법이 있다.

그 중에서도 볼츠만 방정식은 열평형 상태에서가 아닌 다입자계(多粒子系) 운동의 기술에 이용해 이것을 전자군의 거동 해석에 이용하고 있다. 볼츠만 방정식 해석에서는 전자의 거동을 분포함수라고 하는 거시적인 형태로 표시하고, 이 분포함수에서 전자수송계수를 산출한다. 이 방법에서는 충돌의 확률적인 성질을 기초로 하여 전자군 발달(發達)의 통계적 변동은 나타나지 않으며, 통계시간은 비교적 짧다. 그러나, 미적분방정식으로 된 볼츠만 방정식은 일반적으로 그 해를 구하는 것이 어렵고, 종래 많이 사용되어왔다. 전자의 속도분포함수를 Legendre 급수로 전개하고, 그 최초의 2항에 근사하는 2항근사는 전자의 속도분포함수에 비등방성이 강한 경우에는 정확한 전자수송계수를 산출할 수 없는 단점을 가지고 있다.

다음은 본 연구에서 이용된 2항근사 볼츠만 방정식에서 TOF(Time of flight)방법을 이용한 전자수송계수 산출을 보여주고 있다.

TOF에서는 위치와 시간을 함께 지정하기 때문에 샘플 수는 적고 한편으로 에너지분포를 구할 때 샘플 수는 차츰 적어져 통계적 변동을 다수 포함한 결과로 되기 쉽다. 전자 수를 많이 택하면 전자계산기의 계산시간도 그에 비례하여 증가하므로 이것을 보완하기 위하여 순수한 관측 법에서의 차이를 지정하는 영역에서 어느 정도의 폭을 갖게 한다. TOF 샘플링법으로 방전공간의 전자기동속도, 확산계수, 평균에너지를 구하기 위해서는 시간 t_k , t_{k+1} 에서 전자의 샘플 수를 M_k , M_{k+1} 로 하고 위치영역을 $Z(t_k)$ 로 할 때 시간 t_k 에서의 전자군 중심의 평균위치

$\langle Z(t_k) \rangle$ 는 다음과 같이 식 2.1로 나타낸다.

$$\langle Z(t_k) \rangle = \frac{1}{M_k} \sum_{j=1}^{M_k} Z_j(t_k) \quad 2.1$$

전자군의 중심이동속도 W 는 다음과 같다.

$$W = \frac{\langle Z(t_{k+1}) \rangle - \langle Z(t_k) \rangle}{(t_{k+1} - t_k)} \quad 2.2$$

한편 전자의 확산계수는 시간 t_k 일 때 전자의 전계 방향의 중심위치를 $Z_m(t_k)$ 라하면, 종방향확산계수 D_L 은 전자의 전계 방향의 위치분산으로 표현하여 아래의 식과 같이 표현하고, 시간에 대한 기울기로 그 값을 구할 수 있다.

$$\frac{1}{2!M_k} \sum_{j=1}^{M_k} \{Z_j - Z_m(t_k)\}^2 \quad 2.3$$

한편, 횡방향확산계수 D_T 는 전계와 직각방향의 위치분산으로 다음과 같이 표현하고, 시간에 대한 기울기로 구한다.

$$\frac{1}{2} \frac{1}{2!M_k} \sum_{j=1}^{M_k} (r_j^2) \quad 2.4$$

여기서 r_j 는 Z_j 의 직각방향 성분이다. 평균에너지($\bar{\epsilon}$)는 i 번째의 에너지를 ϵ_i 라고 하면

$$\langle \bar{\epsilon} \rangle = \frac{1}{M_k} \sum_{j=1}^{M_k} \epsilon_i \quad 2.5$$

으로 나타낸다.

전자수가 보존되지 않는 경우 즉 전리, 부착이 일어나는 경우에 대해서도 샘플 수 M_k , M_{k+1} 등이 변화하는 상태이므로 동일한 방법으로 구할 수 있다.

3. 전자 충돌 단면적

본 논문에서 사용한 CO₂분자가스의 전자충돌단면적을 그림 1에 나타내었는데 이들 충돌단면적은 전자의 특성을 파악하는 기초 자료로써 상당히 중요하다. 이 분자가스는 그림에서 보여지는 바와 같이 운동량변환단면적과 본 실험실에서 같이 연구했던 다른 가스(Ne, Xe, CF₄)의 단면적 구조와는 다르게 여러개의 진동모드를 가진 다수의 진동여기 단면적, 여기단면적 그리고 전자부성 특성을 나타내는 원인이 되는 부착단면적으로 구성되어지고 있다. 특히 여러 모드의 진동여기단면적중 Q_{v010} 와 Q_{v100} 은 두개의 피크치를 가지고 있어 높은 E/N범위에서 전자수송계수에 영향을 미칠 것으로 사료된다.

에 존재하는 진동여기단면적의 threshold값의 부적절함을 보여주고 있다.

5. 결론

순수 CO₂분자가스의 전자수송계수를 2항근사 볼츠만방정식 해법을 이용하여 $0.01 \text{ Td} \leq E/N \leq 500 \text{ Td}$ 범위에서 계산하였고, Nakamura에 의한 측정결과와 비교하였다. 그 결과 시뮬레이션에 이용된 CO₂분자가스의 전자충돌단면적의 정확한 결정이 요구되어지며, 그전에 다항근사 볼츠만방정식 혹은 몬테칼로 기법에 의한 시뮬레이션을 통해 본 논문에 이용된 2항근사 볼츠만 방정식 기법의 타당성이 요구되어진다.

참고문헌

- [1] H. Itoh, Y. Miura, N. Ikuta, Y. Nakao and H. Tagashira, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 21, pp. 922-930, 1988.
- [2] H. Itoh and T. Musha, *J. Phys. Soc. Japan*, Vol.15, No.9, pp. 1675-1680, 1960.
- [3] R. W. L. Thomas, and W. R. L. Thomas, *J. Phys. B*. Vol. 2, pp. 562-570, 1969.
- [4] M. T. Elford and G. N. Haddad, *Aust. J. Phys.* 33, pp. 517-530, 1980
- [5] Y. Nakamura, *Aust. J. Phys.* 33, pp. 357-363, 1995