

전자충돌단면적과 전자수송계수에 관한 연구

The study of electron collision cross sections and electron transport coefficients in gases

전병훈*, 박재준*, 하성철**

(Byung-Hoon Jeon, Jae-Jun Park, Sung-Chul Ha)

Abstract

Accurate sets of electron collision cross sections for atoms and molecules are necessary for quantitative understanding and modeling of plasma phenomena. So, in this study, we explain the concept of electron collision cross sections for gases, and the principle of determination of the electron collision cross sections for atoms and molecules by using the present electron swarm method.

Key Words : electron collision cross section, electron beam method, electron swarm method, differential cross section, integral cross section

1. 서 론

전계중에 존재하는 기체는 방전·플라즈마 현상으로 전자군의 성질이 변화하게 되므로 이것을 해석하기 위해서는 전자이동속도, 전리계수, 부착계수, 실효전리계수, 종축확산계수, 횡축확산계수, 평균에너지 및 전자에너지 분포함수를 파악하는 것이 상당히 중요하다. 이러한 연구는 초기에 H.Itoh[1], T.Musha[2], Thomas[3]에 의해 연구되었는데 이것은 방전 공간 내에서 나타나는 전체의 전자를 추적하여 전자이동속도 등 전자수송계수의 동향을 조사하여 이들 전자의 물리량을 가상적으로 샘플링(Sampling)하고 그들 하전입자의 운동을 컴퓨터로 계산하여 전자수송계수의 특성을 확률적으로 결정하는 것이다.

이와 같이 플라즈마 현상을 정량적으로 이해

하려고 할 때, 또는 목적에 맞는 플라즈마를 만들기 위한 기체의 종류나 혼합비, 기체 압력 등의 평가를 하려고 할 때, 컴퓨터에 의한 시뮬레이션은 유력한 수단이다. 그리고 시뮬레이션이 정량적으로 있기 위해서는 플라즈마를 구성하는 기체와 전자와의 상호작용에 관한 지식, 특히 전자충돌단면적의 정확한 데이터와 개개의 기체원자/분자가 가지고 있는 전자수송계수의 해석은 필수 불가결한 상태이다.

이에 본 연구에서는 전자충돌단면적에 대한 개념과 전자충돌단면적을 결정하는 전자군 방법(Electron Swarm Method)과 전자빔 방법(Electron Beam Method)에 대하여 소개하고, 특히 본 연구실에서 이용하고 있는 전자군법에 의한 전자수송계수 해석에 관한 예 등을 보여주고자 한다.

2. 전자충돌단면적의 개념

전자-원자충돌의 정량적인 연구는 1921년의 Ramsauer에 의한 전단면적의 측정에서부터 시작되었다. 여기서 희가스원자의 단면적이 낮은 에너지 범위에서 극히 극소치를 가지고 있음을 보여주고

* 중부대학교 정보공학부 전기전자공학과
(충남 금산군 추부면 마전리 산2-25,

Fax : 041-750-6655

E-mail : bhjeon@joongbu.ac.kr

** 동국대학교 전기공학과

있다. 이 사실은 1922년에 Townsend와 Bailey에 의한 전자군 실험에 의해서도 보여주고 있다.

이 Ramsauer-Townsend효과는 산란의 양자론 이후의 발전에 커다란 원동력이 되었다. 이후 현재에 이르기까지 전자충돌단면적 측정의 역사는 길지만, 근래에 들어 이 분야가 주춤하고 있으며, 특히 국내에 있어서는 이 분야에 대한 연구는 전무한 상태에 있다. 전자-원자 충돌의 연구는 서론 부분에서도 언급한 바와 같이 본래적으로 목적으로 하는 원자·분자의 구조에 관한 정보를 얻고, 여러 가지 충돌이론에 대한 평가를 수행하기 위한 데이터를 얻음을 그 목적으로 하고 있지만, 근래에 들어 예를 들어 레이저, 플라즈마, 상충대기 등에 관한 물리분야에서의 단면적 데이터에 대한 요구가 늘어난 것이 급속하게 진보하게 된 원인이 되고 있다. 또한, 진공기술, 하전입자의 검출과 에너지 분석, 각종 레이저 개발, 측정과 데이터 해석을 위한 컴퓨터 등 주위의 기술의 발전이 보다 상세한 고정도의 실험을 가능하게 한 것도 커다란 요인으로 보고 있다.[4]

2.1. 미분단면적

입사전자와 표적원자 사이의 상호작용의 결과 생기는 반응의 확률을 나타내는 충돌단면적은 전자의 입사 시와 산란 후의 에너지 및 산란각에 의존하고 있다.

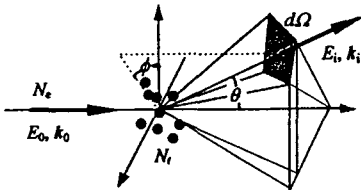


그림 1. 전자산란실험의 개념도

Fig. 1. Diagram of electron scattering

그림 1에서 보이는 바와 같이 운동에너지 E_0 , 운동량 k_0 의 단색으로 일정한 전자빔(유속밀도 $N_e (m^{-2}s^{-1})$)이 z 축으로 입사되고, 또 N_i 개의 표적원자가 좌표 원점부근에 정지하여 놓여있다고 한다. 여기서 표적의 질량은 입사전자에 비해 크고, 실험실 좌표계와 중심좌표계가 일치한다고 한다.

전자의 입사방향에 대한 k_i 의 각(θ, ϕ)로 뻗어가는 입체각요소 $d\Omega$ 안에 단위시간당 산란되고, 그 에너지가 E_i 와 $E_i + dE_i$ 로 있는 전자 수 N_i 는 전자가 표적입자와 기껏 한변정도 밖에 충돌하지 않는 조건 아래에서는 N_e 와 N_i 는 비례하고 다음과 같은 식으로 주어진다.

$$N_i = \frac{d^2\sigma_i(E_0, E_i, \Omega)}{dE_i d\Omega} N_e N_t \quad (1)$$

여기서, 침자 i 는 표적입자가 충돌에 의해 i 상태로 변하는 한 개의 여기과정을 나타내고, 비례계수 $\frac{d^2\sigma_i(E_0, E_i, \Omega)}{dE_i d\Omega}$ 는 2중 미분단면적(DDCS, Doubly Differential Cross Section)이라 부르며, E_i 에 대하여 적분한 $d\sigma_i/d\Omega$ 는 미분단면적(DCS, Differential Cross Section)이라 부른다.

2.2. 적분단면적과 운동량변환단면적

미분단면적을 입체각에 대해 적분한 것을 적분단면적(Integral Cross Section)과 운동량변환단면적(Momentum Transfer Cross Section)이라 부른다. 대부분의 경우, 산란은 측대칭으로 있고, 각각 다음과 같이 나타내고 있다.

$$\sigma_i(E_0) = \int d\Omega \frac{d\sigma_i(E_0, \theta, \phi)}{d\Omega} = 2\pi \int_0^\pi \frac{d\sigma_i(E_0, \theta)}{d\Omega} \sin\theta d\theta \quad (2)$$

$$\sigma_{iM}(E_0) = 2\pi \int_0^\pi \frac{d\sigma_i(E_0, \theta)}{d\Omega} \left[1 - \frac{k_i}{k_0} \cos\theta\right] \sin\theta d\theta \quad (3)$$

2.3. 전단면적

전체 단면적에 대한 합을 전단면적(Total Cross Section)이라 부른다.

$$\sigma_T(E_0) = \sum_i \int \int \frac{d^2\sigma_i(E_0, E_i, \Omega)}{dE_i d\Omega} d\Omega dE_i \quad (4)$$

3. 전자충돌단면적의 측정방법

일반적으로 전자충돌단면적을 측정하는 방법에는 크게 두 가지로 분류되고 있다. 단면적을 실험에 의해 직접 측정할 수 있는 전자빔 방법(Electron Beam Method)과 전자수송계수의 실험값과 계산

값의 비교에 의해 단면적을 결정하는 전자군 방법 (Electron Swarm Method)이다. 전자빔 방법은 실험에 의해 직접 단면적을 측정할 수 있다는 큰 장점을 가지고 있으나 측정되어지는 단면적이 개개의 특성을 가진 단면적이 아닌 전단면적으로 측정이 가능해 목적으로 하고 있는 원자/분자 가스의 특성을 파악하기가 어렵고, 낮은 에너지 범위(약 1 eV 이하)에서의 측정을 불가능하다. 이에 반해 전자빔 방법은 낮은 에너지범위에서의 단면적 결정 및 개개의 특성을 가진 단면적을 결정하는 데는 이상적이나 앞에서 설명한바와 같이 실험에 의한 원자/분자 가스의 전자수송계수의 측정값과 볼츠만방정식 또는 몬테칼로 시뮬레이션 기법을 이용한 계산 결과와의 비교를 통해 단면적을 결정해야하기 때문에 많은 시간과 경험이 요구되어진다. 따라서 본 장에서는 본 연구실에서 이용되고 있는 혼합가스를 이용한 전자군 방법에 대하여 소개하고자 한다.

이전까지의 전자군 방법은 목적으로 하고 있는 순수분자가스에서 전자이동속도 및 종·횡축확산계수의 측정결과와 계산결과와의 비교를 통해 그 단면적을 결정하였기에 다른 수송계수의 특성 분석시 많은 오차를 보여주어 시뮬레이션에 이용되는 단면적의 신뢰성이 많이 떨어져 있었다.

본 연구에서 소개하는 전자군 방법은 총 3단계에 걸쳐 목적으로 하고 있는 원자/분자가스의 전자충돌단면적을 결정한다.

1) 희가스(Ar가스)와 최소량(0.1% 및 0.5%정도)의 목적으로 하고 있는 분자가스와의 혼합가스를 Double Shutter Drift Tube라는 실험 장치를 이용하여 전자이동속도 및 확산계수와 같은 전자수송계수를 측정하고, 2항근사 및 다항근사 볼츠만볼츠만 방정식을 이용한 시뮬레이션을 통해 그 수송계수들의 계산 값을 구한다. 구한 측정값과 계산 값과의 비교를 통해 목적으로 하고 있는 분자가스의 초기 단면적에서 낮은 에너지 범위에 있는 비탄성충돌 단면적 특히, 진동여기단면적을 결정한다. 혼합에 사용되는 희가스인 Ar가스는 낮은 에너지 범위에 Ramsauer Townsend Minimum(RTM)을 갖고 있는 운동량변환단면적(Qm)만이 존재하므로, 측정되어지는 E/N범위(~1000 Td) 내에서는 적은 량의 목적분자가스와의 충돌 시 Ar가스의 Qm과 분자가스의 낮은 에너지 범위에 있는 진동여기단면적만이 영향을 미칠 뿐이다. Ar가스는 현재 여러 논문들에서도 보고 되어져 있지만 그 단면적 구성이 완벽하게 구현되어 있으므로 목적으로 하는 분자가스의 낮은 에너지 범위에 있는 진동여기 단면적만을 결정할 수

있다.

2) 다음은 목적으로 하고 있는 순수분자가스에서 실험결과와 계산결과와의 비교를 통해 혼합가스에서 결정된 목적가스의 낮은 에너지 범위에 있는 진동여기단면적을 포함한 초기단면적의 수정을 가해 그 분자가스가 가지고 있는 운동량변환단면적을 결정한다. 여기서 이용되는 전자수송계수는 전자이동속도와 종·횡축확산계수만을 이용하여 운동량단면적을 결정한다. 이 계수들은 낮은 에너지 범위에서의 진동여기단면적이 결정되었기 때문에 운동량변환단면적만의 수정으로 그 계수들의 특성을 파악 할 수 있기 때문이다.

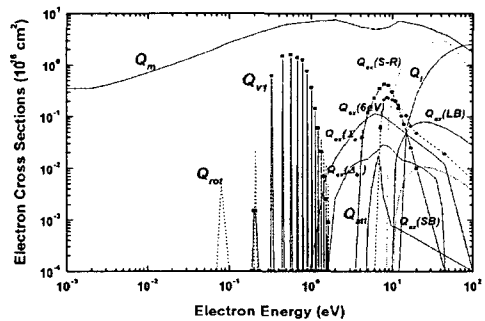


그림 2. O₂분자가스의 전자충돌단면적의 예
Fig. 2. Example of the set of electron collision cross sections for O₂ molecular

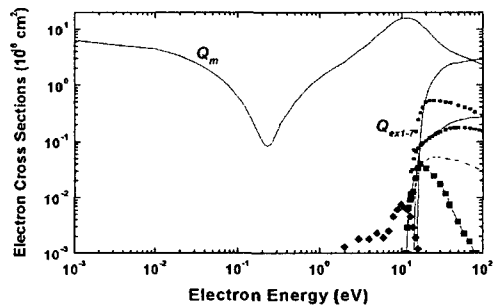


그림 3. Ar원자가스의 전자충돌단면적의 예
Fig. 3. Example of the set of electron collision cross sections for Ar atom

3) 이렇게 혼합가스와 순수가스에서의 실험결과와 계산결과와의 비교에 이용된 수송계수는 단지 전자이동속도와 종·횡축확산계수만이이다. 따라서 혼합과 순수가스에서 구해진 부착, 전리계수 및 여기계수 등을 포함시킨 측정결과와 계산결과와의 비교를 통해

최종적으로 목적으로 하고 있는 분자가스의 정확한 전자충돌단면적을 결정 할 수 있다.

보여주고 있다.

4. 결 론

서론에서도 설명되어진 바와 같이 플라즈마 현상을 정량적으로 이해하려고 할 때, 또는 목적에 맞는 플라즈마를 만들기 위한 기체의 종류나 혼합비, 기체 압력 등의 평가를 하려고 할 때, 컴퓨터에 의한 시뮬레이션은 유력한 수단이며, 그 시뮬레이션이 정량적으로 있기 위해서는 플라즈마를 구성하는 기체와 전자와의 상호작용에 관한 지식, 특히 목적으로 하고 있는 원자/분자가스들의 전자충돌단면적의 정확한 데이터와 개개의 전자수송계수의 해석은 필수 불가결한 상태이다. 이에 본 논문에서는 전자충돌단면적에 대한 기본적인 개념과 본 연구실에서 이용되는 전자충돌단면적을 결정하는 전자군 방법 (Electron Swarm Method)에 대하여 소개하였다. 국내·외 방전·플라즈마분야에서 논문 및 학술 발표를 통해 여러 번 소개는 되었으나 국내에선 전자충돌단면적이나 단면적 결정법에 관한 개념에 관해선 처음으로 소개되어진다고 여겨지며, 이 분야가 기초학문분야의 육성뿐만 아니라 소재 개발 및 대체 에너지 개발에 도움이 되고자 본 논문을 쓰게 되었다.

[참고문헌]

- [1] H. Itoh, Y. Miura, N. Ikuta, Y. Nakao and H. Tagashira, "Electron swarm development in SF₆ : I. Boltzmann equation analysis", J. Phys. D: Appl. Phys. 21, pp. 922-930, 1988.
- [2] H. Itoh and T. Musha, "Monte Carlo Calculations of Motions in Helium", J. Phys. Soc. Japan, Vol.15, No.9, pp. 1675-1680, 1960.
- [3] R. W. L. Thomas, and W. R. L. Thomas, "Monte Carlo Simulation of electrical discharge in gases", J. Phys. B. Vol. 2, pp. 562-570, 1969.
- [4] B. H. Jeon "Determination of electron collision cross sections of O2 and C3F8 molecules by electron swarm study", Thesis of Ph. D. in Keio Univ., pp. 1-162, 1999.

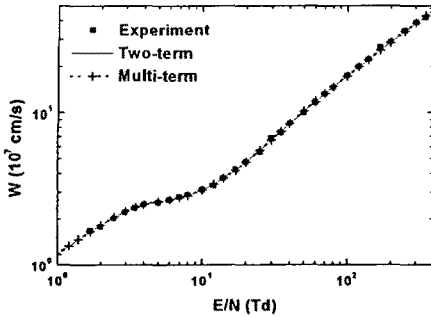


그림 4. O₂분자가스의 전자이동속도의 예
Fig. 4. Example of the electron drift velocity in O₂ molecular

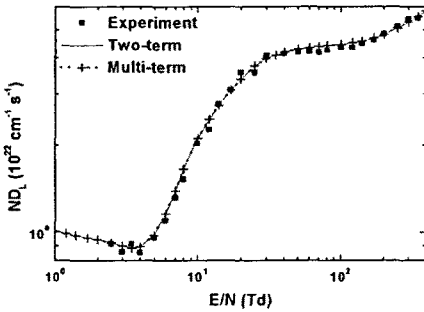


그림 5. O₂분자가스의 종축확산계수의 예
Fig. 5. Example of ND_L in O₂ molecular

보편적으로 우리가 말하고 있는 정확한 전자충돌 단면적 세트란 각각의 전자수송계수의 측정결과와 계산결과와의 오차가 이동속도의 경우 5%이내, 종·횡축확산계수, 전리 및 부착계수 등의 오차가 10%이내를 말하고 있다. 또한 측정결과와 정확도를 높이기 위해 측정하고자하는 한 E/N(Td)에서 적어도 3번 이상의 압력을 가해 측정을 하고, 현재까지 보고된 여러 논문들과 비교·검토하고 있다.

그림2와 3은 이러한 전자군 방법을 이용하여 결정된 O₂분자가스와 본 연구실에서 이용되고 있는 혼합가스를 이용한 전자군 방법에 이용되고 있는 Ar원자가스의 전자충돌단면적의 세트 예이고, 이러한 단면적을 결정하기 위해 이용된 전자수송계수 특히 순수 O₂분자가스에서의 전자이동속도와 종축확산계수의 측정결과와 2항 근사 및 다항근사 볼츠만 방정식을 이용한 계산 결과의 비교 예를 그림 4와 5에 각각