Journal of the Korean Institute of Illuminating and Electrical Installation Engineers Vol. 22, No.8, pp. 104~108 August 2008 논문 22-8-15

Kr과 Xe 원자기체의 전자수송계수의 해석

(The Analysis of Electron Transport Coefficients in Kr and Xe Atom Gas)

전병훈*
(Byung-Hoon Jeon)

요 약

플라즈마 현상의 정량적 이해를 위해서는 원자나 분자기체가 가지고 있는 정확한 전자충돌단면적과 그 전자수송계수의 값을 필요로 한다. 본 연구에서 사용하고 있는 Kr과 Xe 원자기체는 PDP와 무전극램프 등 다양한 산업 응용분야에 이용되고 있다. 따라서 2항 근사 볼츠만 해석에 의해 기체압력 1[torr]의 조건에 0.001~500[Td]의 광범위한 E/N에서 순수 Kr과 Xe 원자기체의 전자이동속도 W, 종·횡축확산계수 ND_L과 ND_T, 전리계수 α/N의 전자수송계수를 계산하고 물성 해석하였다.

Abstract

Accurate sets of electron collision cross sections and the electron transport coefficients for atoms and molecules are necessary for quantitative understanding of plasma phenomena. Kr and Xe atom are used in many industrial applications, such as in PDP and fluorescent induction lamps(FILs). Therefore, we analysed and calculated the electron transport coefficients, the electron drift velocity W, the longitudinal and transverse diffusion coefficient ND_L and ND_T, and the ionization coefficient α/N in pure Kr and Xe gases over the wide E/N range from 0.001 to 500[Td] at 1[Torr] by two-term approximation of the Boltzmann equation.

Key Words : Electron Drift Velocity, Ionization Coefficient, Xe(Xenon), Kr(Krypton), Electron Collision Cross Sections Set

1. 서 론

어떠한 목적에 맞는 기체방전 현상을 정량적으로 만들고 이해하기 위해서는 이용하고자 하는 기체의 종류나 혼합비, 기체 압력 등의 평가가 필요하며, 이러한 평가를 위해서는 직접적인 실험적 방법이 아닌 1차적 과정인 컴퓨터에 의한 시뮬레이션이 요구된다. 그리고 시뮬레이션이 정량적으로 있기 위해서는 기체와 전자와의 상호작용에 관한 지식, 특히 전자충돌단면적의 정확한 데이터와 개개의 기체 원자/분자가 가지고 있는 전자수송계수의 해석은 필수 불가결한 상태이다. 이러한 기체 중의 하전입자의 전자수송계수를 측정하는 방법에는 2항 근사와 다항근사의 볼츠만방정식 해법과 몬테칼로 시뮬레이션기법

* 주저자 : 동국대학교 전기공학과 교수
Tel : 02-2260-3995, Fax : 02-2275-0162
E-mail : bhjeon@dgu.edu
접수일자 : 2008년 6월 2일
1차심사 : 2008년 6월 9일
심사완료 : 2008년 7월 10일

이 있으며 본 연구에서는 2항 근사에 의한 방법에 의해 해석한다.

본 연구에 이용되고 있는 Kr과 Xe 원자기체는 PDP (Plasma Display Panel)의 발광 봉입기체[1]와 무전극 형광램프의 방전관 주입기체[2]로 주로 사용되고 있다. 그러나 PDP의 경우 Ne기체와의 혼합을 통해 봉입된 기체의 이온 에너지에 의한 전극표면의 손상으로 인해 수명저하의 주된 요인이 되고 있으며, 무전극램프의 경우 Kr과 Xe원자기체의 적절한 혼합과 그에 따른 압력비 및 휘도에 대한 표준화를 찾지 못하고 있는 실정이다. 본 논문에서는 전자군 방법을 이용하여 Kr과 Xe 원자기체의 전자충돌단면적을 가지고 2항근사 볼츠만 방정식을 이용하여 0.001~500[Td]에 이르는 광범위한 E/N 범위에서 두 원자기체의 전자이동속도와 확산계수 그리고 전리계수의 전자수송계수를 계산하고 이를 물성적으로 해석한다.

2. 2항 근사 볼츠만방정식 해석

2항 근사와 다항 근사의 기법을 가지고 있는 볼츠만 방정식은 열평형 상태에서가 아닌 다입자계(多粒子系) 운동의 기술을 이용해 전자군의 거동 해석을 해석하고 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 짧으나 미적분방정식으로 되어 있어 일반적으로 그 해를 구하는 것이 어렵다. 전자의 속도분포함수를 Legendre 급수로 전개하고, 그 최초의 항을 2항에 근사하여 전개하면 2항 근사법, 5항 이상에 근사하면 다항 근사법이라 한다. 2항근사법은 전자의 속도분포함수에 비등방성이 강한 경우에는 정확한 전자수송계수를 산출할 수 없는 단점을 가지고 있지만 시뮬레이션 시간이 짧다는 장점을 가지고 있어 많이 사용되고 있다. 특히, 본 연구에서 이용하는 Xe, Kr 원자기체와 같은 불활성기체는 탄성충돌과 비탄성의 여기 및 전리충돌단면적으로 이루어져 있기 때문에 2항 근사에 의한 방법에 의해서도 정확한 산출값을 얻고 있다[3].

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

TOF에서는 위치와 시간을 함께 지정하기 때문에 샘플 수는 적고 에너지 속도분포를 구할 때 샘플 수는 차츰 적어져 통계적 변동을 다수 포함한 결과로 되기 쉽다. 전자 수를 많이 택하면 컴퓨터의 계산시간도 그에 비례하여 증가하므로 이것을 보완하기 위하여 순수한 관측법에서의 차이를 지정하는 영역에서 어느 정도의 폭을 갖게 한다. TOF 샘플링법으로 방전공간의 전자이동속도, 확산계수를 구하기 위해서는 시간 t_k, t_k+1에서 전자의 샘플 수를 M_k, M_k+1로 하고 위치영역을 $Z(t_k)$로 할 때 시간 t_k에서의 전자군 중심의 평균위치 $\langle Z(t_k)\rangle$는 다음과 같이 식 2.1로 나타내며, 이에 따른 전자군의 이동속도 W는 식 2.2로 주어진다.

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

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

한편 전자의 확산계수는 시간 t_k일 때 전자의 전계방향의 중심위치를 $Z_m(t_k)$라 하면, 종축확산계수 D_L은 전자의 전계 방향의 위치분산으로 표현하여 아래의 식과 같이 표현하고, 시간에 대한 기울기로 그 값을 구할 수 있다.

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

한편, 횡축확산계수 D_T는 전계와 직각방향의 위치분산으로 다음과 같이 표현하고, 시간에 대한 기울기로 구한다.

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

여기서 r_j는 Z_j의 직각방향 성분이다.

또한 SST기법에 의해 전리주파수를 얻으며 전리

주파수와 이동속도의 관계로부터 전리계수 값을 구할 수 있다[4].

3. 전자 충돌 단면적

본 논문에서 사용한 Kr과 Xe 원자기체의 전자충돌단면적[5]을 각각 그림 1과 2에 나타내었는데 이들 충돌단면적은 전자의 특성을 파악하는 기초 자료로써 상당히 중요하다.

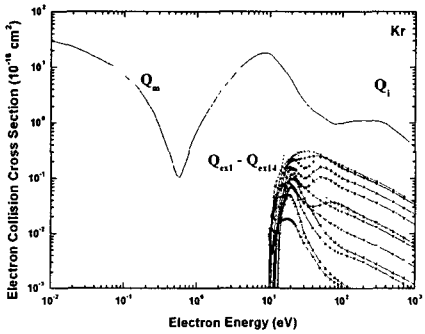

그림 1. Kr 원자기체의 전자충돌단면적
Fig. 1. The electron collision cross sections set for Kr atom gas

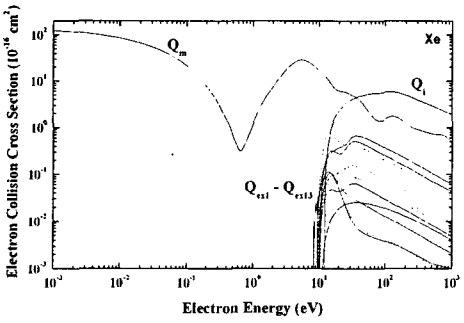

그림 2. Xe 원자기체의 전자충돌단면적
Fig. 2. The electron collision cross sections set for Xe atom gas

특히 이들 원자기체의 특징은 그림에서 보이는 바와 같이 약 10[eV]의 문턱에너지(threshold energy)를 가지고 있는 다수의 여기단면적(Kr 원자기체의 경우 9.915~14[eV]의 문턱에너지를 가지고 있는 14개의 여기단면적, Xe 원자기체의 경우 8.315~11.58[eV]의 문턱에너지를 가지고 있는 13개의 여기단면적)으로 구성되어 있고, 불활성가스의 대표적 특징인 낮은 에너지(0.4~0.8[eV]) 범위에서 운동량 변환단면적(Q_m)의 Ramsauer Townsend Minimum (RTM)을 가지고 있다. 또한 원자번호가 클수록 전리충돌단면적의 문턱에너지 값이 낮게 됨을 알 수 있다.

4. 결과 및 고찰

4.1 전자이동속도

그림 3은 0.001~500[Td]에 이르는 광범위한 E/N 범위에서 2항 근사 볼츠만 방정식을 이용한 두 원자기체의 전자이동속도의 계산결과를 보여주고 있다.

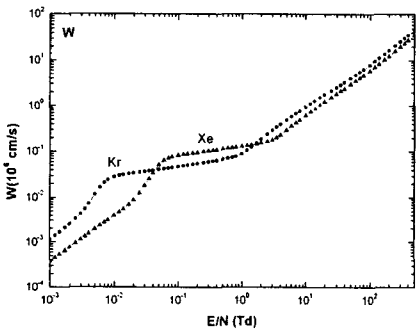

그림 3. 순수 Kr과 Xe 원자기체의 전자이동속도
Fig. 3. The electron drift velocity in pure Kr and Xe atoms gas

그림에서 보는 바와 같이 두 원자기체는 Q_m의 낮은 전자에너지범위의 RTM에 의해 E/N증가에 따라 전자이동속도 W의 증가가 일정부근에서 서서히 증가(또는 감소)하는 부구배 특성(Negative Differential Conductivity, NDC)[6]이 보이고 있다. 또한, RTM의 전자에너지 범위와 그때의 단면적 값, Q_m의 크기변화(Xe 원자기체가 Kr 원자기체에 비해 Q_m의 큰 낙차 값을 가지고 있음.) 그리고 RTM의 전자에너지 범위와 비탄성의 여기단면적의 문턱에너지 값과의 간격에 의해 Kr 원자기체의 전자이동속도가 Xe 원자기체에 비해 넓은 E/N영역에서 NDC가 보이게 된다.

4.2 확산계수

그림 4와 5는 두 원자기체의 종축확산계수 D_L과 횡축확산계수 D_T를 기체분자수밀도 N과의 곱의 관계인 ND_L과 ND_T를 E/N의 함수로 나타낸 것이다.

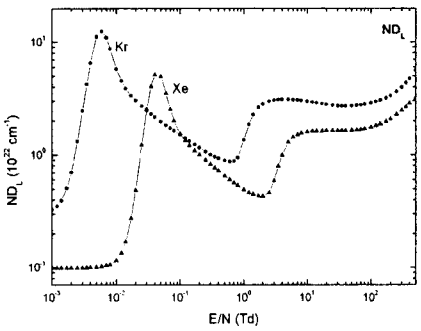

그림 4. 순수 Kr과 Xe 원자기체에서의 종축확산계수 (D_L)와 기체분자수밀도(N)와의 곱
Fig. 4. ND_L in pure Kr and Xe atoms gas

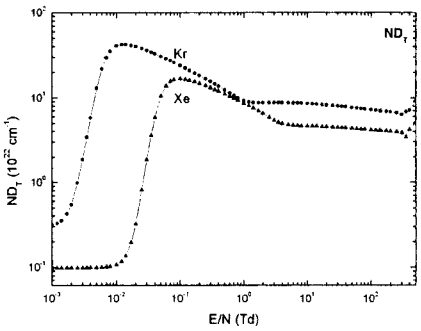

그림 5. 순수 Kr과 Xe 원자기체에서의 횡축확산계수(D_T)와 기체분자수밀도(N)와의 곱
Fig. 5. ND_T in pure Kr and Xe atoms gas

두 원자기체의 확산계수의 결과는 그림 3에서 보여준 전자이동속도의 결과처럼 낮은 E/N영역에서는 열평형상태를 보이며, 전계가 가해지면서 확산계수가 증가하다가 Q_m의 RTM영역에서 급격히 증가하다 감소하는 NDC현상이 뚜렷하게 보여주고 있다. Kr 원자기체의 경우 0.8[Td] 영역에서, Xe 원자기체의 경우 2[Td] 영역에서 각 기체원자가 가지고 있는 첫 번째 문턱에너지를 가지고 있는 여기단면적의 영향으로 급격히 증가하다가 10[eV] 부근에 있는 다수의 비탄성충돌단면적의 영향으로 포화영역을 보여주고 있다. 두 원자기체는 3절의 각 원자기체의 단면적에서도 언급한 바와 같이 총 구성하는 단면적의 형태가 유사하기 때문에 확산계수의 모양이 유사한 형태를 유지하고 있으나 4.1의 전자이동속도에서 언급한 바와 같이 RTM의 전자에너지 범위와 그때의 단면적 값, Q_m의 크기변화 및 RTM의 전자에너지 범위와 비탄성의 여기단면적의 문턱에너지 값과의 간격에 의해 Kr 원자기체의 확산계수가 Xe 원자기체에 비해 낮은 E/N영역에서 NDC현상이 보이고 있다.

4.3 전리계수

그림 6은 두 원자기체의 전리계수를 E/N의 함수로 나타낸 것이다. 대표적인 불활성가스의 5종류(He, Ne, Ar, Kr, Xe)의 전리계수 값은 원자번호가 커질수록 전자가 기체원자와 충돌하여 이온화과정을 발생할 수 있는 가능성에 관련된 전리충돌단면적의 문턱에너지가 낮으며, 또한 그에 근접한 여기단면적의 문턱에너지와의 간격이 짧아 원자번호가 커질수록 전리가 늦게 형성됨을 알 수 있다. Kr 원자기체의 전리충돌단면적의 문턱에너지는 14[eV]이며, Xe 원자기체의 문턱에너지는 12.13[eV]이다.

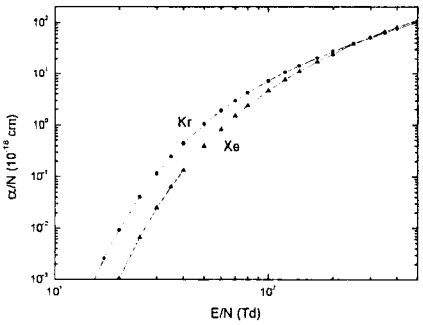

그림 6. 순수 Kr과 Xe 원자기체에서의 전리계수
Fig. 6. The ionization coefficient in pure Kr and Xe atoms gas

5. 결 론

순수 Kr과 Xe 원자기체의 전자수송계수를 2항 근

사 볼츠만방정식 해법을 이용하여 0.001[Td]≤E/N ≤500[Td]의 범위에서 계산하였다. 그 결과 두 원자기체의 계산된 전자수송계수들은 운동량변환단면적의 RTM에 의해 NDC현상이 보이고 있으며, 이러한 현상에 기인하여 다른 기체와의 혼합 시 그 물성적 특성을 고려하지 않으면 안 된다. 특히, 봉입된 방전기체의 혼합비에 따른 PDP의 수명저하와 무전극램프의 표준화 기체비율의 적절성에 관하여 연구가 지속되는 가운데 본 연구에서 보여준 두 원자기체의 전자수송계수에 관한 물성적 해석은 다른 기체와의 혼합이나 유사 불활성 기체와의 혼합 비율을 결정하는데 있어서 고려해야 할 부분이며, 향후 혼합기체의 비율을 달리하여 적절한 기체비율 값을 결정하는 것이 과제로 남아있다.

References

[1] T. Masumoto, "Elctronic Display", Japan Ohm, pp. 83-117, 1995.

[2] H. I. Kim, "A Study on the Characteristics analysis and the Standardization of Fluorescent Induction Lamps", Thesis of Dongguk Univ., 2007.

[3] S. C. Ha and B. H. Jeon, "A study of electron transport coefficients in SiH4-Ar mixture gas by using Boltzmann equation and Monte-Carlo simulation", J. KIEEME 14, 2 pp. 169- 174, 2001.

[4] A. E. D. Heylen, "Influence of Molecular Bonding on the 새준둥 Ionization Coefficients of Hydrocarbon Gases", J. Chem. Phys. 38, pp. 765-771, 1963.

[5] M. Hayashi, "Luminous layers in the prebreakdown region of low pressure noble gases.", J. Phys. D 15, pp. 1411-1418, 1982.

[6] Y. Nakamura and M. Kurachi, "Electron Transport Parameters in Argon and its momentum transfer cross section" J. Phys. D21, pp. 718-723, 1988.

◇ 저자소개 ◇

전병훈 (全炳勳)

1969년 2월 18일생. 1992년 동국대 전기공학과 졸업. 1994년 동 대학원 전기공학과 졸업(석사). 1999년 일본 Keio Univ. 전기공학과 졸업(박사). 1999~2000년 일본 Keio Univ. 전자공학과 방문연구원. 2000년~2005년 중부대학교 전기전자공학과 조교수. 2005년~현재 동국대학교 전기공학과 조교수.