

전자군 방법에 의한 전자충돌단면적 결정

Determination of the Electron Collision Cross Sections by Electron Swarm Method

전병훈*, 하성철**

(Byung-Hoon Jeon* and Sung-Chul Ha**)

Abstract

The electron-atom collision studies have been essentially used for testing and developing suitable theories of the scattering and collision processes, and for providing a tool for obtaining detailed information on the structure of the target atoms and molecules and final collision products. And, the development of that has also been strongly motivated by the need for electron collision data in such fields as laser physics and development, astrophysics, plasma devices, upper atmospheric processes and radiation physics. The concept and the principle of determination of the electron collision cross sections for atoms and molecules by using the present electron swarm method are explained.

Key Words : Electron collision cross section, Electron beam method, Electron swarm method, Differential cross section, Integral cross section

1. 서론

원자에 의한 전자산란에 대한 연구는 1921년 Ramsauer에 의한 전(全)충돌단면적 측정에 의해 처음 시작되었다. 이 단면적은 일명 전자빔 방법이라고 불리는 방법에 의해 매우 낮은 에너지 범위에서 원자와 분자가 매우 낮은 값을 가졌으며, 최초로 다양한 에너지 범위에서 최소와 최고값이 존재하는 전(全)단면적의 측정이었다. 그리고 다음 해인 1922년에 Townsend와 Bailey는 낮은 에너지 범위(<1 eV)에서 회가스를 가지고 단면적을 측정하였는데 이것이 전자군 방법의 시초라 할 수 있다. 전자군과 전자빔 방법의 시초자의 이름을 붙여

Ramsauer-Townsend효과라 불려지고 있는데, 이 효과는 양자 충돌 이론의 발전에 큰 역할을 하였으며, 현재에 이르기까지 전자충돌단면적을 결정하는 이론적, 실험적 측면에서 계속 발전되어지며 이용되고 있다. 일반적으로 전자-원자 충돌에 관한 연구는 충돌 진행 및 산란현상의 적절한 이론의 발전 및 테스트에 이용되며, 목적으로 삼고 있는 원자나 분자 구조의 정확한 정보를 파악하는데도 이용되고 있다[1].

일반적으로 전자충돌단면적을 측정하는 방법은 크게 두 가지로 분류되고 있다. 단면적을 실험에 의해 직접 측정할 수 있는 전자빔 방법(Electron Beam Method)과 전자수송계수의 실험 값과 계산 값의 비교에 의해 단면적을 결정하는 전자군 방법(Electron Swarm Method)이 있다. 전자빔 방법은 실험에 의해 직접 단면적을 측정할 수 있다는 큰 장점은 가지고 있으나 측정되어지는 단면적이 개개의 특성을 가진 단면적이 아닌 전단면적으로 측정이 가능해 목적으로 하고 있는 원자/분자 가스

* : 중부대학교 정보공학부 전기전자공학과
(충남 금산군 추부면 마전리 산2-25,
Fax : 041-750-6655

Corresponding Author : bhjeon@joongbu.ac.kr)

** : 동국대학교 전기공학과

2002년 9월 24일 접수, 2002년 10월 23일 1차 심사완료,
2002년 12월 6일 2차 심사완료, 2003년 2월 17일 최종 심사완료

의 특성을 파악하기가 어렵고, 낮은 에너지 범위 (<1 eV)에서의 측정은 불가능하다. 이에 반해 전자군 방법은 낮은 에너지범위에서 단면적을 결정하거나 개개의 특성을 가진 단면적을 결정하는 데 이상적이지만, 앞에서 설명한 바와 같이 실험에 의한 원자/분자 가스의 전자수송계수의 측정값과 볼츠만방정식 또는 몬테칼로 시뮬레이션 기법[2]을 이용한 계산 결과와의 비교를 통해 단면적을 결정해야하기 때문에 많은 시간과 경험이 요구되어진다. 따라서 본 연구에서는 단면적의 기본 개념과 본 연구실에서 행하여지고 있는 혼합가스를 이용한 단면적 결정에 이용되는 전자군 방법에 대하여 소개하고자 한다.

2. 전자충돌단면적의 기본 개념

Ramsauer에 의한 전단면적의 측정에서는 희가스원자의 단면적이 낮은 에너지범위에서 극소치를 가지고 있음을 보여주고 있다. 이 사실은 1922년에 Townsend와 Bailey에 의한 전자군 실험에 의해서도 보여주고 있다. 이 Ramsauer-Townsend효과는 산란의 양자론 이후의 발전에 커다란 원동력이 되었다[1]. 이 후 현재에 이르기까지 전자충돌단면적 측정의 역사는 길지만, 그 역사에 비해 얻어진 데이터는 미약하며, 특히 국내에 있어서는 이 분야에 대한 연구는 전무한 상태에 있다. 전자-원자 충돌의 연구는 서론 부분에서도 언급한 바와 같이 본래 목적으로 하는 원자·분자의 구조에 관한 정보를 얻고, 여러 가지 충돌이론에 대한 평가를 수행하기 위한 데이터 얻음을 그 목적으로 하고 있으나, 근래에 들어서는 레이저, 플라즈마, 상충대기 등에 관련된 진공기술, 하전입자의 검출과 에너지 분석, 각종 레이저 개발, 측정과 데이터 해석 등 물리전자 분야에서 필요한 고정도의 기체분자의 단면적 데이터를 요구하고 있다.

2.1 미분단면적

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

전자산란 실험의 개념을 나타낸 그림 1에서 보는 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_t 개의 표적원자가 좌표 원점

부근에 정지하여 놓여있다고 가정한다.

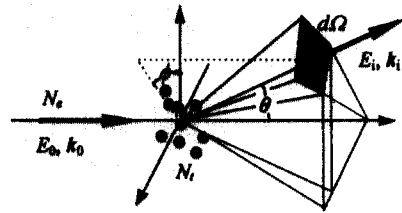


그림 1. 전자산란실험의 개념도.
Fig. 1. Diagram of electron scattering.

여기서 표적의 질량은 입사전자에 비해 크고, 실험실 좌표계와 중심좌표계가 일치한다고 한다. 전자의 입사방향에 대한 k_i 의 각 (θ, ϕ) 로 뿔어가는 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 한번정도 밖에 충돌하지 않는 조건 아래에서는 N_e 와 N_i 는 비례하고 다음과 같은 식으로 주어진다.

$$N_i = \frac{d^2 \sigma_i(E_0, E_i, \Omega)}{dE_i d\Omega} N_e N_t \quad (2.1)$$

여기서, 첨자 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 축대칭으로 있고, 각각 다음과 같이 나타내고 있다.

$$\sigma_i(E_0) = \int d\Omega \frac{d\sigma_i(E_0, \theta, \phi)}{d\Omega} = 2\pi \int_0^\pi \frac{d\sigma_i(E_0, \theta)}{d\Omega} \sin\theta d\theta \quad (2.2)$$

$$\sigma_{IM}(E_0) = 2\pi \int_0^\pi \frac{d\sigma_i(E_0, \theta)}{d\Omega} \left[1 - \frac{k_i}{k_0} \cos \theta \right] \sin \theta d\theta \quad (2.3)$$

2.3 전단면적

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

$$\sigma_T(E_0) = \sum_i \int \int \frac{d^2\sigma_i(E_0, E_i, \Omega)}{dE_i d\Omega} d\Omega dE_i \quad (2.4)$$

3. 전자군 방법

전계 중에 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[3], T. Musha[4], Thomas[5]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. 또한 컴퓨터 계산을 통한 전자수송계수의 특성을 파악하기 위해서는 플라즈마를 구성하는 기체와 전자와의 상호작용에 관한 지식, 특히 전자충돌단면적의 정확한 데이터가 필수 불가결하다.

이전까지의 전자군 방법은 목적으로 하고 있는 순수분자가스에서의 전자이동속도 및 종·횡축확산계수의 측정결과와 계산결과와의 비교를 통해 그 단면적을 결정하였기에 다른 수송계수의 특성 분석 시 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[6].

1) 회가스(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 볼츠만 방정식을 이용한 시뮬레이션을 통해 그 수송계수들의 값을 계산한다. 구한 측정값과 계산 값과의 비

교를 통해 목적으로 하고 있는 분자가스의 초기단면적에서 낮은 에너지 범위에 있는 비탄성충돌단면적 특히, 진동여기단면적을 결정한다. 혼합에 사용되는 회가스인 Ar가스는 낮은 에너지 범위에 Ramsauer Townsend Minimum(RTM)을 갖고 있는 운동량변환단면적(Qm)만이 존재하므로, 측정되어지는 E/N 범위 (환산전계 : 전계강도와 기체분자수밀도와의 비, ~1000 Td, 1 Td=10⁻¹⁷V·cm²) 내에서는 적은 량의 목적분자가스와의 충돌 시 Ar가스의 Qm과 분자가스의 낮은 에너지 범위에 있는 진동여기단면적만이 영향을 미칠 뿐이다. Ar가스는 현재 여러 논문들도 보고되고 있지만 그 단면적 구성이 완벽하게 구현되어 있으므로 목적으로 하는 분자가스의 낮은 에너지 범위에 있는 진동여기 단면적만을 결정할 수 있다.

2) 다음은 목적으로 하고 있는 순수분자가스에서의 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.

3) 이렇게 혼합가스와 순수가스에서의 실험결과와 계산결과와의 비교에 이용된 수송계수는 단지 전자이동속도와 종·횡축확산계수만이다. 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.

3.1 실험방법

앞에서 설명한 바와 같이 전자군 방법을 이용하여 혼합기체와 순수가스에서의 전자수송계수를 측정하기 위해서는 Double Shutter Drift Tube라는 실험 장치를 이용하며, 그림 2에 그 구성도를 보여주고 있다.

진공계는 U.V Lamp에서의 자외선을 초기전자로 받아 tube내에 공급하는 Photo Cathode(K)와 1 mm 간격으로 구성되어 있는 스테인리스 원판인 2개의 전자 Shutter(S1, S2), Collector(C), 그리고 드리프트 거리를 1cm 에서 10 cm 까지 가변할 수 있도록 하고 다이얼 게이지에 의해 조정할 수 있는 10개의 가이드링(GRs)으로 구성되어 있다.

컬렉터(C)는 직경 82 mm의 스테인리스 원판이고 GR은 내경 100 mm, 두께 9 mm의 스테인리스 원판으로 전자가 이동영역을 평등전계에서 이동할 수 있도록 하였다. 측정은 TOF(Time Of Flight)법으로 하고, E/N, 기체 압력, 기체 온도 등의 일정한 조건에서 전극사이에 초기전자를 발생시켜 전리전류를 Pico Electrometer(TR-8651)로 측정한다.

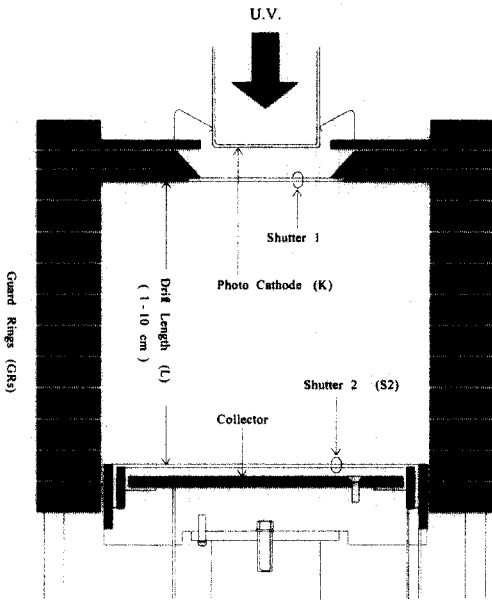


그림 2. Double Shutter Drift Tube의 구성도.
Fig. 2. Schematic diagram of Double Shutter Drift Tube.

그리고 진공도와 봉입기체의 압력측정에는 전리진공계와 바라트론 메타를 이용하며, 펄스전압은 Pulse Generator(PG230)에 의해 인가한다. 측정에 의해 얻어지는 전자도착 시간분포의 예를 그림 3에서 보여주고, 전자도착분포의 대칭성을 보여주고 있을 때 중심도착시간과 드리프트 거리와의 관계로부터 전자이동속도 등의 전자수송계수 값을 구한다.

3.2 시뮬레이션 방법

목적으로 하고 있는 원자/분자의 전자충돌단면적을 결정하기 위해서는 앞에서 설명한 바와 같이 실험에 의해 측정된 값과 시뮬레이션에 의해 계산된 값과의 비교를 통해 정확한 단면적 세트를 결정할 수 있다. 시뮬레이션 방법에는 크게 볼츠만 방정식 해석법과 몬테칼로 해석법으로 구분되며, 볼츠만 방정식 해석법은 2항근사와 다항근사[7]라는 방법으로 구분되고 있다. 모든 방법에서 전자수송계수의 계산 값을 구하기 위해서는 2장에서 서술한 단면적, 특히 미분단면적의 데이터가 우선적으로 필요하며, 그 데이터는 현재까지 보고된 여러 논문들에서 실험값 중심의 신뢰도가 높은 것으로 그 값을 유출해 내고 있다[8].

열평형 상태에서가 아닌 다입자계(多粒子系) 운동의 기술에 이용한 볼츠만 방정식은 전자군의 거동 해석에 이용한다. 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. 전자의 속도분포함수를 Legendre 급수로 전개하고, 그 최초의 2항에 근사하는 2항근사는 현재까지 보고된 기체들의 단면적 세트가 복잡하고 독특한 구조로 이루어지지 않아 적은 시간으로 계산값을 유도해 내어 많이 이용되어 왔으나, 전자의 속도분포함수에 비등방성이 강한 경우에는 정확한 전자수송계수를 산출할 수 없는 단점을 가지고 있다.

다음은 일반적으로 많이 이용되고 있는 2항근사 볼츠만 방정식에서 TOF(Time of flight)방법을 이용한 전자수송계수 산출을 보여주고 있다[2].

TOF에서는 위치와 시간을 함께 지정하기 때문에 샘플 수는 적고 한편으로 에너지 분포를 구할 때 샘플 수는 차츰 적어져 통계적 변동을 다수 포함한 결과로 되기 쉽다. 전자 수를 많이 택하면 전자계산기의 계산시간도 그에 비례하여 증가하므로

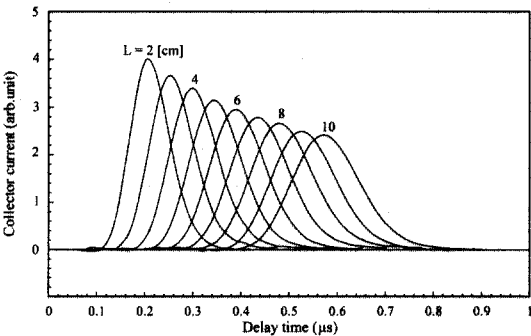


그림 3. 전자도착분포의 한 예(0.6 Torr, 140 Td).
Fig. 3. An example for arrival time distribution of electrons in pure O₂ (0.6 Torr, 140Td).

이것을 보완하기 위하여 순수한 관측 법에서의 차이를 지정하는 영역에서 어느 정도의 폭을 갖게 한다. TOF 샘플링법으로 방전공간의 전자이동속도, 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 3.1로 나타낸다.

$$\langle Z(t_k) \rangle = \frac{1}{M_k} \sum_{j=1}^{M_k} Z_j(t_k) \quad (3.1)$$

전자군의 중심이동속도 W 는 다음과 같다.

$$W = \frac{\langle Z(t_{k+1}) \rangle - \langle Z(t_k) \rangle}{(t_{k+1} - t_k)} \quad (3.2)$$

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.

$$\frac{1}{2!M_k} \sum_{j=1}^{M_k} \{Z_j - Z_m(t_k)\}^2 \quad (3.3)$$

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

$$\frac{1}{2} \frac{1}{2!M_k} \sum_{j=1}^{M_k} (r_j^2) \quad (3.4)$$

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

$$\bar{\epsilon} = \frac{1}{M_k} \sum_{j=1}^{M_k} \epsilon_j \quad (3.5)$$

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.

그림 4와 5는 이러한 전자군 방법을 이용하여 본 연구에서 단면적을 결정하기 위해 이용된 전자

수송계수 특히 순수 전자이동속도와 종축확산계수의 측정결과와 2항 근사 및 다항근사 볼츠만 방정식을 이용한 계산 결과의 비교 예를 각각 보여주고 있고, 그림 6과 7은 이러한 전자군 방법을 이용하여 본 연구실에서 결정된 O_2 분자가스와 일반적으로 혼합가스를 이용하여 목적으로 하는 분자/원자의 정확한 전자충돌단면적을 결정하기 위해 혼합가스로서 많이 이용되고 있는 Ar원자가스의 전자충돌단면적의 세트 예를 보여주고 있다.

보편적으로 우리가 말하고 있는 정확한 전자충돌단면적 세트란 각각의 전자수송계수의 측정결과와 계산결과와의 오차가 이동속도의 경우 5%이내, 종·횡축확산계수, 전리 및 부착계수 등의 오차가 10%이내를 말하고 있다.

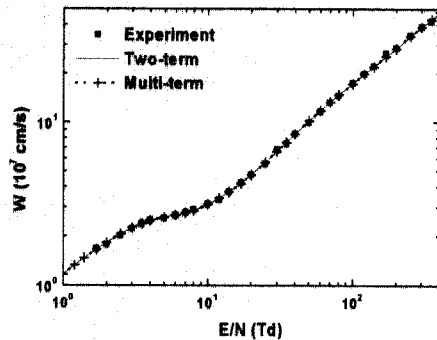


그림 4. O_2 분자가스의 전자이동속도의 예.
Fig. 4. Example of the electron drift velocity in O_2 molecular.

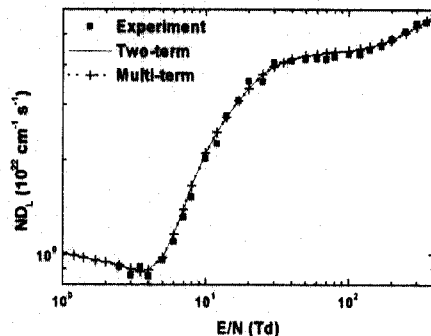


그림 5. O_2 분자가스의 종축확산계수의 예.
Fig. 5. Example of ND_L in O_2 molecular.

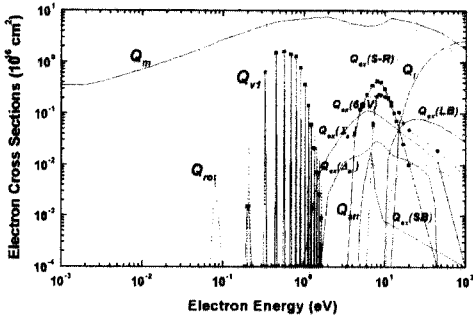


그림 6. O₂분자가스의 전자충돌단면적의 예.
 Fig. 6. Example of the set of electron collision cross sections for O₂ molecular.

또한 전자수송계수들의 측정의 정확도를 높이기 위해 본 연구에서는 한 E/N에서 적어도 3번 이상의 압력을 가해 측정을 하고, 현재까지 여러 논문들에서 보고 된 전자수송계수들의 데이터를 측정 결과와 비교·검토한다.

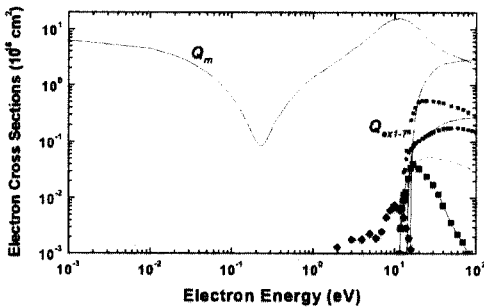


그림 7. Ar원자가스의 전자충돌단면적의 예.
 Fig. 7. Example of the set of electron collision cross sections for Ar atom.

4. 결 론

플라즈마 현상을 정량적으로 이해하려고 할 때, 또는 목적에 맞는 플라즈마를 만들기 위한 기체의 종류나 혼합비, 기체 압력 등의 평가를 할 때, 컴퓨터에 의한 시뮬레이션은 유력한 수단이며, 시뮬레이션을 통한 정량적 분석이 되기 위해서는 플라즈마를 구성하는 기체와 전자와의 상호작용에 관한 지식, 특히 목적으로 하고 있는 원자/분자가스

들의 전자충돌단면적의 정확한 데이터와 개개의 전자수송계수의 해석은 필수 불가결하다.

이에 본 논문에서는 전자충돌단면적에 대한 기본적인 개념과 혼합가스와 목적으로 하는 순수가스에서의 전자수송계수의 측정 결과와 볼츠만 방정식을 이용한 계산결과와의 비교를 통해 전자충돌단면적을 결정하는 전자군 방법 (Electron Swarm Method)에 대하여 소개하였다.

참고 문헌

- [1] 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., p. 1, 1999.
- [2] 하 성철, 전 병훈, "볼츠만 방정식과 몬테칼로 법에 의한 SiH₄-Ar혼합가스의 전자수송계수에 관한 연구", 전기전자재료학회논문지 14권, 2호 p. 169, 2001
- [3] 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, p. 922, 1988.
- [4] H. Itoh and T. Musha, "Monte Carlo calculations of motions in helium", J. Phys. Soc. Japan, Vol. 15, No. 9, p. 1675, 1960.
- [5] R. W. L. Thomas and W. R. L. Thomas, "Monte Carlo simulation of electrical discharge in gases", J. Phys. B., 2, p. 562, 1969.
- [6] B. H. Jeon and Y. Nakamura, "Measurement of drift velocity and longitudinal diffusion coefficient of electrons in pure oxygen and in oxygen-argon mixtures", J. Phys. D, 31, p. 2145, 1998
- [7] B. H. Jeon, S. C. Ha, and J. M. Yang, "Determination of the inelastic cross sections for C₃F₈ molecule by electron swarm study", Trans. on EEM, Vol 2, No. 1, p. 7, 2001
- [8] S. C. Ha, B. H. Jeon, and Y. Nakamura, "Determination of vibrational excitation cross section for molecular oxygen through measurement of electron transport coefficients in O₂-Ar mixtures", Trans. on EEM, Vol 2, No. 1, p. 45, 1996