

CO₂기체의 운동량 변환충돌단면적 및 전자에너지분포함수 특성해석 (Characteristics Analysis of Momentum Transfer Cross Section and Electron Energy Distribution Functions of CO₂ Gas)

하성철*, 윤상호*
(Sung-Chul Ha, Sang-Ho Yun)

요 약

CO₂기체의 운동량변환, 진동여기, 전자여기 및 전리충돌 단면적의 결정은 온도 293(° K), 상대전계의 세기 E/N은 1.0(Td) ≤ E/N ≤ 200(Td)의 범위에서 볼츠만 방정식을 Backward-Prolongation 방법으로 해석하여, 전자 이동속도의 계산값을 산출하고 이것을 M. T. Elford에 의해 실험적으로 측정된 이동속도의 값과 비교하였다.

본 연구에서 운동량변환충돌단면적은 Hake & Phelps의 값을 기초로 하였으며, 온도 293(° K), 상대전계의 세기 E/N은 3.0(Td) ≤ E/N ≤ 50(Td)인 범위 전자에너지분포함수 및 전자특성에너지는 상대전계의 세기 E/N이 1.0(Td) ≤ E/N ≤ 200(Td)인 범위에서 산출하였다.

Abstract

The determination of the cross section of CO₂ gas for momentum transfer, vibration excitation, electron excitation and ionization are compared to experimental and calculated value of electron drift velocity, by using Backward-Prolongation method of Boltzmann equation at 293(° K), for 1.0(Td) ≤ E/N ≤ 200(Td).

In this research, momentum transfer cross section refer to cross section data of Hake & Phelps, so, the derived drift velocity will satisfy the experimental value of M. T. Elford, and then energy distribution function and characteristic energy have been calculated at 293(° K), for 3.0(Td) ≤ E/N ≤ 50(Td) and 1.0(Td) ≤ E/N ≤ 200(Td).

* : 동국대학교 전기공학과

1. 서론

일반적으로 기체의 방전 과정은 전자, 이온, 여기분자, 光子, 분자등 각 입자들의 상호 작용에 의한 현상이다. 이러한 현상을 정량적으로 해석하기 위하여는 첫째로 각 입자간의 충돌 단면적과 같은 충돌 메카니즘, 둘째로 각 입자의 밀도, 셋째로 각 입자의 속도와 에너지분포함수를 알아야 한다. 특히 전자에 관한

여러가지 양을 정량적으로 파악하는 것은 전자군의 물리적인 현상을 명확하게 규명하는 것이다.

전자에너지분포는 여기충돌, 전리충돌등의 비탄성충돌에 의해 에너지의 증가가 억제되면 맥스웰분포로부터 벗어나는 경향이 있고, 전자에너지분포로부터 계산되는 수송계수에 영향을 주게 된다. 그러므로 운동량변환충돌단면적 및 진동여기충돌단면적, 전자여기충돌단

CO₂ 기체의 운동량 변환충돌단면적 및 전자 에너지분포함수 특성해석

면적, 전리충돌단면적등의 각종 비탄성충돌단면적의 값으로부터 기체시료의 전자에너지분포함수 및 전자특성에너지를 포함한 각종 수송계수를 산출할 수 있다. 따라서 본 연구에서는 He+N₂+CO₂ 혼합기체 Laser 매질에 대한 기초연구로써¹⁾ 볼츠만의 수송방정식을 Backward-Prolongation 방법으로 해석하여,²⁾ CO₂ 기체의 전자이동속도의 측정값으로부터 운동량변환충돌단면적, 진동여기충돌단면적, 전자여기충돌단면적 및 전리충돌단면적을 결정하고 아울러 온도는 293(° K), 상대전계의 세기 E/N은 1.0(Td) ≤ E/N ≤ 200(Td)의 범위에서, CO₂ 기체의 전자에너지분포함수 및 전자특성 에너지를 산출하려한다. 본 연구의 1(Td)는 10⁻¹⁷ [Vcm²]을 의미한다.

2. 볼츠만 수송방정식

위치벡터 \vec{r} , 속도벡터 \vec{v} , 시간을 t라고 할 때 어떤 시간 t에서 위치는 \vec{r} 과 $\vec{r}+d\vec{r}$ 사이의 내부공간에 존재하는 입자의 수를 dN(\vec{r}, \vec{v}, t)로 하면

$$dN(\vec{r}, \vec{v}, t) = f(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{r}d\vec{v} \quad (1)$$

로 표현되고 이 때의 f(\vec{r}, \vec{v}, t)를 이들 입자의 분포함수라 한다. 또한 어떤 시각 t에서 식(1)과 같이 표현된 입자의 수 dN는 미소시간 dt 후에는 dN'로 된다. 이 때 위치는 $\vec{r}' = \vec{r} + \vec{v}dt$ 이고 속도는 $\vec{v}' = \vec{v} + (d\vec{v}/dt)dt$ 로 되어 dN'는 미소체적요소 d \vec{r}' d \vec{v}' 를 이용하여 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$dN' = f(\vec{r}+\vec{v}dt, \vec{v} + d\vec{v}/dt dt, t+dt) d\vec{r}'d\vec{v}' \quad (2)$$

여기서 적분변수에 대응하는 d \vec{r}' d \vec{v}' 을 d \vec{r} d \vec{v} 로 표현하기 위하여 $\vec{r}' = \vec{r} + \vec{v}dt$, $\vec{v}' = \vec{v} + (d\vec{v}/dt)dt$ 의 관계를 이용하면 Jacobian은 1로 되어

$$d\vec{r}'d\vec{v}' = d\vec{r} d\vec{v} \quad (3)$$

로 표현할 수 있다. 따라서 이러한 관계를 이용하여 식(2)와 식(1)의 차를 구하여 다음과 같이 표현할 수 있다.³⁾

$$dN' - dN = (f(\vec{r}+\vec{v}dt, \vec{v} + d\vec{v}/dt dt, t+dt) - f(\vec{r}, \vec{v}, t)) d\vec{r} d\vec{v} \quad (4)$$

$$= (\partial f/\partial t + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + d\vec{v}/dt \cdot \nabla_{\vec{v}} f)$$

$$dt d\vec{r} d\vec{v}$$

여기서 $\nabla_{\vec{r}}$, $\nabla_{\vec{v}}$ 는 각각 위치공간 및 속도공간에 관한 gradient 연산자를 의미한다. 또한 dt간의 충돌에 따른 입자수의 변화는 dt d \vec{r} d \vec{v} 에 비례하기 때문에 이 때의 비례정수를 ($\partial f/\partial t$)_{coll}라고 쓰면

$$dN' - dN = (\partial f/\partial t)_{coll} dt d\vec{r} d\vec{v} \quad (5)$$

가 된다.

따라서 식(5)는 다음과 같이 정리 할 수 있다.

$$\partial f/\partial t + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + \alpha \cdot \nabla_{\vec{v}} f = (\partial f/\partial t)_{coll} \quad (6)$$

이 때 $\alpha = -eE/m = dv/dt$, $f = f(r, v, t)$ 이다.

여기서 좌변의 제 1항은 분포함수의 시간적 변화, 제 2항은 입자의 운동에 따른 확산현상의 영향을 나타내는데 이는 분포함수의 공간에 기울기가 존재하는 것을 의미하며, 제 3항은 외력의 영향을 나타내며 외력에 의해서 입자의 속도분포가 변화하게 되는데 만약 입자가 속도공간에 완전히 충돌만 되어 있다면 이 항은 존재하지 않는다.⁴⁾ 그리고 우변의 ($\partial f/\partial t$)_{coll}항은 전자와 전자, 이온과 중성분자와의 충돌에 따른 f(\vec{r}, \vec{v}, t)의 변화의 비율을 나타내는 항이며, 여기에는 탄성충돌항, 전자여기충돌항, 전리충돌항 및 부착충돌항등을 포함할 수 있다.⁵⁾ 또한 식(6)으로부터 얻는 전자분포함수 f(\vec{r}, \vec{v}, t)는 시간과 위치의 함수로 표시되는 전자의 밀도 n(\vec{r}, t)와 전자에너지분포함수 f(u)로 분리하여 다음과 같이 표시할 수 있다.⁶⁾

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t) = n(\vec{r}, t)f(u) \quad (7)$$

여기서 에너지분포함수 f(u)는 위치(\vec{r})와 시간(t)의 변화에 대하여 무관하며, 따라서 탄성충돌, 여기충돌 및 전리의 효과를 고려하고 단일기체인 경우의 전자의 운동특성은 Frost & Phelps에 의해 해석된 다음과 같은 식을 이용하여 표현한다.⁷⁾

$$\frac{d}{du} \left[\frac{E^2 u}{3NQ_m(u)} \frac{d}{du} f(u) \right] + \frac{2m}{M} \frac{d}{du} \left[u^2 N Q_m(u) \left\{ f(u) + \frac{kT}{e} \frac{d}{du} f(u) \right\} \right] + \sum \left[(u+u_j) f(u+u_j) N Q_j(u+u_j) - u f(u) N Q_j(u) \right] + \int_u^\infty N Q_i(u_x+u_i) f(u_x+u_i) P_i(u/u_x) du_x - N Q_i(u) u f(u) = 0 \quad (8)$$

여기서

N: 기체의 밀도 m: 전자의 질량
M: 기체분자의 질량 T: 절대온도(° K)
K: 볼츠만 정수 e: 전자의 전하량

Qm: 운동량변환단면적

Qj: 여기충돌단면적 Qi: 전리충돌단면적

Pi(u/ux)dux: ux + ui 인 에너지를 갖는 전자가 u와 u+du인 범위의 에너지를 갖는 확률이며 du/ux로 근사화한다.

전자와 기체분자와의 충돌이 탄성충돌로써 고려되면 Backward-Prolongation 방법에 의해 식(8)을 적분함으로써 다음과 같은 전자에너지분포함수를 얻을 수 있다.⁸⁾

$$f(u) = A \exp \left[- \int_0^u \left(\frac{ME^2}{6mN^2Q_m^2(u)} + \frac{kT}{e} \right) du \right] \quad (9)$$

또한 비탄성충돌이 고려되면 다음과 같이 표현된다.⁹⁾

$$f(u) = B \exp \left[- \int_0^u D(u) du \right] \quad (10)$$

여기서 D(u)는 다음과 같으며

$$D(u) = \frac{- \frac{2mu^2NQ_m(u)f(u)}{M} + \int_0^\infty \left[\frac{e^2E^2u}{3NQ_m(u)} + \frac{2m}{M} u^2 \left(\sum T_j + T_i \right) \frac{d}{du} \left(\frac{N Q_m(u)kT}{M} \right) f(u) \right] du}{\left[\frac{e^2E^2u}{3NQ_m(u)} + \frac{2m}{M} u^2 \left(\sum T_j + T_i \right) \frac{d}{du} \left(\frac{N Q_m(u)kT}{M} \right) f(u) \right]}$$

Tj는 진동여기충돌 및 부착충돌등의 비탄성충돌항을 의미하며 Ti는 전리충돌항을 의미하는데 다음과 같이 표현한다.

$$T_j = (u+u_j) f(u+u_j) N Q_j(u+u_j) - u f(u) N Q_j(u)$$

$$T_i = \int_u^\infty N Q_i(u_x+u_i) f(u_x+u_i) P_i(u/u_x) du_x - N Q_i(u) u f(u)$$

$$(u/u_x) du_x - N Q_i(u) u f(u)$$

그리고 상수 A 및 B는 에너지분포함수를 다음과 같이 정규화하므로써 얻어진다.

$$\int_0^\infty u^{1/2} f(u) du = 1$$

또한 식(8)로부터 계산된 식(9) 및 식(10)의 에너지분포함수와 다음의 식을 이용하여 전자기동속도(Vd), 확산계수(D) 및 전자특성 에너지(I/μ) 등의 수송계수를 계산한다.¹⁰⁾

$$V_d = - \frac{E(2e)}{3(m)}^{1/2} \int_0^\infty \frac{u}{NQ_m(u)} \frac{\partial}{\partial u} f(u) du \quad (11)$$

CO₂ 기체의 운동량 변환충돌단면적 및 전자 에너지분포함수 특성해석

$$D = \frac{1}{3} \left(\frac{2e}{m} \right)^{1/2} \int_0^{\infty} \frac{u}{NQ_m(u)} f(u) du \quad (12)$$

$$D/\mu = - \frac{1}{e} \frac{\int_0^{\infty} [f(u)/Q_m(u)] du}{\int_0^{\infty} [u/Q_m(u)] [df(u)/du] du} \quad (13)$$

위의 식(8), 식(9), 식(10) 및 식(11)으로부터 알 수 있는 바와 같이 이동속도는 운동량변환충돌단면적과 전자에너지분포함수의 변화율에 관한 함수로써 표현되며, 전자에너지분포함수도 역시 운동량변환충돌단면적 및 비탄성충돌단면적의 함수로써 표시되고 있다. 이는 전자에너지분포함수와 전자기동속도가 운동량변환충돌단면적(Q_m)의 값에 따라서 크게 의존하며, 비탄성충돌은 단지 전자에너지분포함수에 관계되어 전자가 높은 에너지에 도달하는 것을 방지하는 것을 의미한다.

3. 해석 결과 및 검토

그림 1에 본 연구에서 결정된 충돌 단면적의 값을 나타내었고, 그림 2에서는 M, T Elford에 의해 측정된 CO₂ 기체의 전자기동속도의 값 및 본 연구에서 산출된 전자기동속도의 값을 비교하여 나타내었다.

충돌 단면적의 결정은 Hake & Phelps에 의해 제시된 운동량변환충돌단면적 Q_m, 진동여기충돌단면적 Q_v 및 전리충돌단면적 Q_i를 사용하여,¹¹⁾ 이들 충돌단면적의 값을 볼츠만수송방정식에 대입하여 Backward-Prolongation 방법으로 계산하여 전자 에너지 분포함수 및 전자기동속도의 값을 산출하였다. 산출된 이동속도의 값은 M, T Elford에 의해 측정된 V_d의 값과 비교하여 일치할 때까지 충돌단면적의 값을 수정하여 계산하였다. 그 결과 그림 2에 표시된 바와 같이 계산된 V_d의 값과 M, T Elford에 의해 측정된 V_d의 값이 일치하였으며,¹²⁾ 이 때의 충돌 단면적을 그림 1에 표

시하고 CO₂ 기체의 충돌 단면적으로 결정하였다. 그림 3에 3.0(Td) ≤ E/N ≤ 50(Td) 범위의 전자에너지분포함수가 표시되었는데, 이 범위에서 전자에너지분포는 1[eV] 이하의 값에서 급격히 하락하고 있다. 이는 에너지의 증가가 심하게 억제되고 있음을 뜻하는데, 이러한 현상은 그림 1의 충돌 단면적의 도표에서 표현된 CO₂ 기체의 진동여기충돌이 1[eV] 이하의 값에서 매우 활발하기 때문이며 또한 Q_v의 영향은 E/N의 값이 커질수록 미약함을 알 수 있다. 또한 전자에너지는 3[eV] 지나면서 다시 감소하며 이것은 전자여기충돌단면적 Q_v가 3[eV]를 지나면서 활발해지기 때문에 전자의 에너지 증가가 억제되는 것으로 사료된다. 또한 그림 2에 전자특성에너지의 값을 나타내었다. 온도 293(°K)에서의 맥스웰분포의 경우 전자특성에너지의 값은 0.03788인데 그림에서 보이는 바와 같이 본 연구에서의 상대전계의 범위인 3(Td) ≤ E/N ≤ 50(Td)에서 모두 맥스웰분포의 값보다 크다. 즉 비 맥스웰 분포를 이루고 있다.

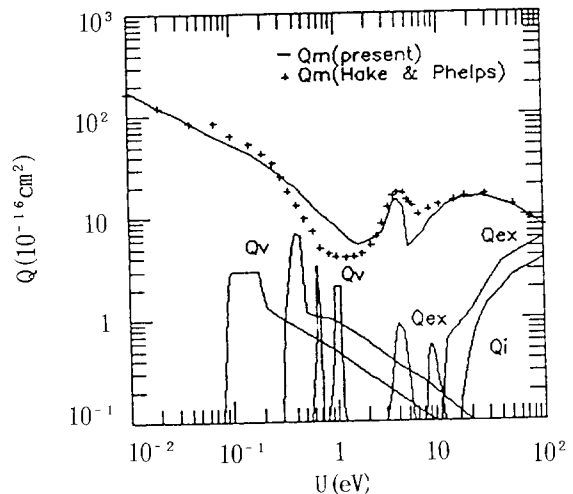


그림 1 CO₂ 기체의 충돌 단면적
Fig. 1 Collision Cross Sections of CO₂ Gas

4. 결론

본 연구의 결과 산출된 전자 이동속도는 M, T, Elford의 측정치와 비교하여 온도 293(°K) 상대전계의 세기 E/N은 1.0 (Td) ≤ E/N ≤ 200 (Td)의 범위에서 일치되었으며 아울러 운동량

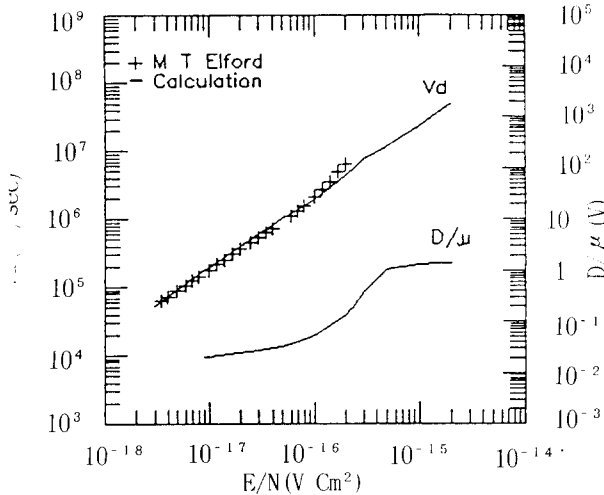


그림 2 CO₂기체중의 전자이동속도 및 전자특성에너지

Fig. 2 Electron Drift Velocity and Electron Characteristic Energy in CO₂ Gas

변환충돌단면적, 진동여기충돌단면적, 전자여기충돌단면적, 전리충돌단면적이 결정되었다.

이러한 충돌단면적의 값을 볼츠만방정식에 적용하여 Backward-Prolongation 방법으로 해석하여 전자 에너지분포함수를 산출하였으며 전자의 에너지 분포는 비탄성 충돌의 영향으로 에너지의 증가가 억제되지만 상대전계의 세기 E/N의 증가에 따라 이러한 비탄성 충돌의 영향은 상대적으로 미약하며 전자특성에너지의 값은 293(K)에서의 맥스웰 분포의 값보다 매우 크다. 즉 본 연구의 범위에서 CO₂ 기체는 비 맥스웰 분포를 이루고 있다.

참고문헌

1. J. J. Lowke, A. V. Phelps and B. W. Irwin, "Predicted Electron Transport Coefficients and Operating Characteristics", J Appl. Phys., Vol. 44, 10, 4664, 1973.
2. B. Sherman, "The Differential Equation of Electron Energy Distribution in a Gas", J. of Math Analysis and Application 1, 342-354, 1969.
3. J. S. Chang, R. M. Hobson, "電離氣體의 原子分子過程", 東京電氣大學出版局 1984年.
4. 奥田孝美, 氣體 PLASMA 現象 コロナ社, 1975年.

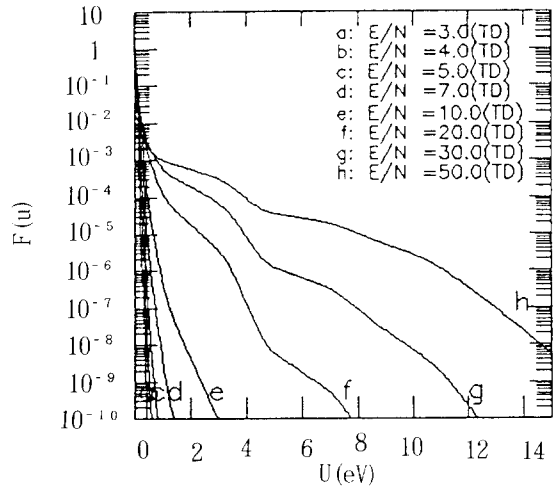


그림 3 CO₂기체중의 전자에너지분포함수

Fig. 3 Electron Energy Distribution Function in CO₂ Gas

5. T. Holstein, "Energy Distribution of Electrons in High Frequency Gas Discharges", Phys. Rev., Vol. 70, 5, 367, 1946.
6. Y. Nakamura and J. Lucas, "Electron Drift Velocity and Momentum Cross-section in Mercury, Sodium and Thallium Vapours : II Theoretical", J. Phys. D, Vol. 11, 337, 1978.
7. L. S. Frost and A. V. Phelps "Rotational Excitation & Momentum Transfer Cross-section for Electrons in H₂ & N₂ from Transport Coefficients", Phys. Rev., Vol. 127, 5, 1621, 1962.
8. L. S. Frost and A. V. Phelps "Momentum Transfer Cross-section for slow Electrons in He, Ar, Kr, and Xe from Transport Coefficients", Phys Rev., 136, 6A, 1964.
9. J. Lucas, "Energy Distributions for Electron Swarms in Hydrogen at High Value of E/P", Int. J. Electronics, Vol. 27, 3, 201, 1969.
10. L. G. H. Huxely and R. W. Crompton, "The Diffusion and Drift of Electrons in Gases", John Wiley and Sons, 1974.
11. R. D. Hake and A. V. Phelps, "Momentum Transfer & Inelastic collision Cross Section for Electrons in O₂-CO-CO₂",

CO₂ 기체의 운동량 변환층들단면적 및 전자
에너지분포함수 특성해석

Phys. Rev. , 158, 70, 1967.

12. M. T. Elford " The Drift Velocity of
Electrons in Carbon Dioxide at 293° K"
Aust. J. Phys. , 19, 629, 1966.

(1992년 10월 31일 접수)



윤상호

1959년 4월 18일생. 1987년 2월 동
국대 전기공학과 졸업. 1989년 2월
동국대 대학원 전기공학과 석사. 19
92년 현재 동국대 대학원 전기공학
과 박사과정 수료. 현재 유한공전
강사



하성철

1940년 12월 25일생. 1968년 2월
인하대 전기공학과 졸업. 1985년
2월 명지대 전기공학과 졸업(공박)
1992년 현재 동국대 전기공학과
부교수. 당 학회 편수이사.