

# H<sub>2</sub>, CO 기체중에서 전자군의 이동속도 및 충돌단면적 결정에 관한 연구

## (A Study on the Determination of Collision Cross Sections and the Drift Velocity of Electron Swarm in H<sub>2</sub>, Co gas)

하성철\*, 하영선\*  
(Seong-Chol Ha, Young-Sun Ha)

### 요 약

전계가 인가된 H<sub>2</sub>와 CO기체중을 통과하는 전자의 탄성과 비탄성 충돌 단면적을 볼츠만방정식을 이용하여 추정하였는데, 충돌 단면적은 운동량변환, 진동여기, 해리, 전자 여기 및 전리 충돌 단면적을 이동속도의 측정값 및 계산값을 비교하므로써 결정하였다. Gibson과 Phelps가 각각 계산한 H<sub>2</sub> 및 CO의 운동량변환 충돌단면적을 본 연구의 결과와 비교하였으며 이를 기초로하여, 온도는 293°K, 상대전계의 세기 E/N은  $1 \times 10^{-17} [\text{Vcm}^2] \leq E/N \leq 200 \times 10^{17} [\text{Vcm}^2]$ 의 범위에서 전자에너지 분포함수를 산출하였으며, 이렇게 산출된 에너지 분포함수 및 충돌단면적은 실험적으로 측정된 모든 수송계수의 값들을 만족하였다.

### ABSTRACT

By means of a numerical solution of the Boltzmann equation, elastic and inelastic collision cross sections have been derived for electrons moving through H<sub>2</sub> and Co gas under the action of electric field. The cross section for momentum transfer, vibrational excitation, dissociation excitation, electron excitation and ionizations are determined by comparing experimental and theoretical values of drift velocity. The same momentum transfer cross section previously obtained for H<sub>2</sub> by Gibson and CO by Phelps have been found to be valid and then Energy distribution functions have been calculated for 293[K],  $1 \times 10^{-17} [\text{Vcm}^2] \leq E/N \leq 200 \times 10^{17} [\text{Vcm}^2]$ . The derived energy distribution and cross section will satisfy the experimental values of all the transfer coefficients.

\* 동국대학교 전기공학과

## 1. 서 론

기체는 보통의 상태에서 전기적으로 중성인 분자로서 이루지지만 기체중에 전극을 설치하고 전압의 크기를 증가시키면, 전극에서는 전자가 생성되고 기체는 이온을 생성하여 전리기체가 된다<sup>1)</sup> 따라서 전리기체는 전자, 이온등의 하전 입자와 중성인 원자, 분자등으로 구성되며, 이들입자들은 열운동 및 전계의 영향으로 인한 이동(drift), 충돌(collision), 확산(diffusion), 전리(ionization)등의 현상 때문에 기체의 전기적 성질이 변화하게 된다. 그러므로 이와 같은 현상들을 정량적으로 해석하기 위해서는 운동량변환충돌단면적, 여기충돌단면적, 전리충돌단면적, 이동속도, 확산계수, 전자에너지분포함수에 대한 정확한 양이 필요하며, 특히 전계를 인가한 기체중에서의 전자의 이동속도는 전기전도도와 전자의 충돌단면적 결정, 전자에너지분포함수 및 확산계수등을 계산하는데 매우 중요한 요소이다.

충돌단면적, 전자에너지분포함수 및 수송계수(이동속도, 이동도, 확산계수, 평균에너지)의 산출은 절연내력의 향상을 위한 연구, 조명용 램프, 기체레이저매질의 개발, 기체플라즈마와 같은 응용분야에서 전기적 성질의 해석과 예측에 매우 중요한 량이다. 이와 같은 기체중의 전자군의 운동특성을 연구하기 위하여는 입자의 운동과정을 확률적인 방법으로 파악하는 몬테카르로 방법과 전자군중의 전자가 시간에 따라 변화하는 위치함수 및 속도함수로 표시되는 볼츠만방정식에 의한 방법등 여러가지가 있다<sup>2)</sup> 그중에서도 볼츠만 방정식에 의한 방법은 다수의 입자를 포함하는 電子流로써 취급하며, 전

자군의 운동특성에 대한 連續的 예측이 가능하고, 계산시간이 짧은 이점이 있으므로 충돌단면적으로부터 수송계수를 산출하는 방법으로써 많이 이용되고 있다 이러한 점을 고려하여 본 연구에서는 볼츠만의 수송방정식이론에 Backward-Prologation 방법을 적용하고, 시행착오적인 방법으로 해석하고자한다. 이는 운동량변환충돌단면적을 가상하여 전자에너지분포함수를 계산하고 계산된 전자에너지분포함수로부터 전자의 이동속도를 계산하여 이미 실험적으로 측정된 전하이송속도와 비교하여 일치하도록 충돌단면적의 값을 계속 수정하여 계산하므로써 운동량변환충돌단면적 및 각종 비탄성충돌단면적을 결정하며, 결정된 충돌단면적을 이용하여 전자에너지분포함수, 전하이송속도등의 수송계수를 산출한다. 본 논문에서는 고효율 대출력의 혼합기체 레이저매질(He+CO<sub>2</sub>+N<sub>2</sub>)에 대한 기초연구로써<sup>3)</sup> 순수 H<sub>2</sub> 및 CO 기체를 시료로써 선택하며 전계의 범위는  $1 \leq E/N \leq 200 \times 10^{-17} [\text{vcm}^2]$ , 온도는 293[°K]에서, 대형전산기(Cyber-930)를 이용하여 H<sub>2</sub> 및 CO기체 각각의 운동량변환충돌단면적 및 각종 비탄성충돌단면적(진동여기충돌, 전자여기충돌, 전리충돌단면적 등)과 수송계수를 산출하고 산출한 전하이송속도를 H<sub>2</sub>의 경우는 J.J.Lowke, CO의 경우는 Nakamura의 실험값과 비교한다. 여기서 1[Td]는  $10^{-17} [\text{Vcm}^2]$ 을 의미한다.

### 2-1. 볼츠만 수송방정식

기체중을 운동하는 전자의 특성은 전자분포함수에 의한 볼츠만 수송방정식에 의해 다음과 같이 표현된다.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{a} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} \quad (1)$$

$$\mathbf{a} = -e\mathbf{E}/m, \mathbf{F} = \mathbf{f}(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{v}}, t)$$

여기서 좌변의 제1항은 분포함수의 시간적 변화, 제2항은 입자의 운동에 따른 확산현상의 영향을 나타내는데 이는 분포함수의 공간에 기울기가 존재하는 것을 의미하며, 제3항은 외력의 영향을 나타내며 외력에 의해서 입자의 속도분포가 변화하게 되는데 만약 입자가 속도공간에 완전히 충돌하여 있다면 이 항은 존재하지 않는다. 그리고 우변의  $(\partial f/\partial t)_{\text{coll}}$  항은 전자와 전자, 이온과 중성분자와의 충돌에 따른  $\mathbf{f}(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{v}}, t)$ 의 변화의 비율을 나타내는 항이며, 여기에는 탄성충돌항, 전자여기충돌항, 전리충돌항 및 부착충돌항등을 포함할 수 있다<sup>4)</sup>. 또한 식(1)로부터 얻는 전자분포함수  $\mathbf{f}(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{v}}, t)$ 는 시간과 위치의 함수로 표시되는 전자의 밀도  $n(\vec{\mathbf{r}}, t)$ 와 전자에너지분포함수  $f(u)$ 로 분리하여 다음과 같이 표시할 수 있다.

$$\mathbf{f}(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{v}}, t) = n(\vec{\mathbf{r}}, t) f(u) \quad (2)$$

여기서 에너지분포함수  $f(u)$ 는 위치( $\mathbf{r}$ )와 시간( $t$ )의 변화에 대하여 무관하다는 가정이 필요하다.  $f(u)$ 가 위치( $\mathbf{r}$ )에 무관하다는 의미는 전자의 확산(Diffusion)이 전자의 이동(Drift)에 비해 무시되어질 때 가능하다. 또한  $F(u)$ 가 시간( $t$ )에 대하여 무관하다는 가정은 이동(Drift)시간이 에너지 이완(Relaxation)시간 보다 훨씬 길게 될 때 가능하다<sup>5)</sup>.

따라서 탄성충돌, 여기충돌 및 전리충돌의 효과를 고려하여 단일기체인 경우의 전자의 운

동특성은 Frost & Phelps에 의해 제시된 다음과 같은 식을 이용하여 표현한다.<sup>6)</sup>

$$\begin{aligned} & \frac{d}{du} \left[ \frac{E^2 u}{3N Q_m(u)} \frac{d}{du} f(u) \right] + \frac{2m d}{M du} \\ & [U^2 N Q_m(u) \{ f(u) + \frac{kT}{e} \frac{d}{du} f(u) \}] \\ & + \Sigma [(u+ju) f(u+uj) N Q_i(u+ju) - u f(u) \\ & N Q_i(u)] \\ & + \int_u^\infty N Q_i(u_x+u_i) f(U_x+U_i) P_i(u/u_x) du_x - N Q_i \\ & (u) u f(u) = 0 \end{aligned} \quad (3)$$

여기서

- N : 기체의 밀도
- m : 전자의 질량
- M : 기체분자의 질량
- T : 절대온도[°K]
- K : 볼츠만 정수
- e : 전자의 전하량
- Q<sub>m</sub> : 운동량변화단면적
- Q<sub>i</sub> : 여기충돌단면적
- Q<sub>i</sub> : 전리충돌단면적
- P<sub>i</sub> : (u/u<sub>x</sub>) du<sub>x</sub> : u<sub>x</sub>+u<sub>i</sub>인 에너지를 갖는 전자가 u<sub>x</sub>과 u<sub>x</sub>+u<sub>i</sub>인 범위의 에너지를 갖는 확률이며 du/u<sub>x</sub>로 근사화한다.

전자와 기체분자와의 충돌이 탄성충돌로써 고려되면 식(3)을 적분함으로써 다음과 같은 전자에너지분포함수를 얻을 수 있다.

$$f(u) = A \exp \left[ - \int_0^u \frac{ME^2}{6mN_2 Q_m^2(u) u} + \frac{Kt^{-1}}{e} \right] du \quad (4)$$

또한 비탄성충돌이 고려되면 다음과 같이 표현된다.<sup>8)</sup>

$$f(u) = B \exp \left[ \int_0^\infty D(u) du \right] \quad (5)$$

여기서 D(u)는 다음과 같으며

$$D(u) = \frac{\frac{2mu^2NQm(u)f(u)}{M} + \int_0^\infty [\Sigma T_j + T_i] du}{\left[ \frac{e^2 E^2 u}{3NQm(u)} + \frac{2mu^2 N Qm(u) kT}{M} \right] f(u)}$$

또한 T<sub>j</sub>는 진동여기충돌 및 부착충돌등의 비탄성충돌항을 의미하여 T<sub>i</sub>는 전리충돌항을 의미하는데 다음과 같이 표현한다.

$$T_j = (u + u_j)f(u + u_j)NQj(u + u_j) - uf(u)NQj(u)$$

$$T_i = \int_u^\infty NQi + (ux + ui)f(ux + ui)P_i(u/ux) du x - NQi(u)uf(u)$$

여기서  $u = 1/2mv^2$ 은 전자의 질량(m)과 속도(v)로써 표현되는 전자의 운동에너지이며, Qm(u)은 에너지의 함수로 표시되는 운동량변환 단면적이고, 또한 상수 A 및 B는 다음식을 이용한 정규화 과정을 통하여 얻어질 수 있다.

$$\int_0^\infty u^B f(u) du = 1$$

또한 식(3)으로부터 계산된 식(4) 및 식(5)의 에너지분포함수와 다음의 식을 이용하여 전자 이동속도(V<sub>d</sub>), 확산계수(D) 및 전자특성에너지(D/μ)등의 수송계수를 계산한다.<sup>9)</sup>

$$V_d = -\frac{E}{3} \left[ \frac{2e}{m} \right]^B \frac{u}{NQm(u)} \frac{\partial}{\partial u} f(u) du \quad (6)$$

$$D = \frac{1}{3} \left[ \frac{2e}{m} \right]^B \frac{u}{NQm(u)} f(u) du \quad (7)$$

$$D/\mu = -\frac{1}{e} \int_0^\infty \frac{[f(u)/Qm(u)] du}{[u/Qm(u)][df(u)/du] du} \quad (8)$$

위의 식(3), 식(4), 식(5) 및 식(6)으로부터 알 수 있는 바와 같이 이동속도는 운동량변환 충돌단면적과 전자에너지분포함수의 변화율에 관한 함수로써 표현되며, 전자에너지분포함수도 역시 운동량변환충돌단면적 및 비탄성충돌단면적의 함수로써 표시되고 있다. 이는 전자에너지분포함수와 전자이동속도가 운동량변환충돌 단면적(Qm)의 값에 따라서 크게 의존하며, 비탄성충돌은 단지 전자에너지분포함수에 관계되어 전자가 높은 에너지에 도달하는 것을 방지하는 것을 의미한다.

### 3. 해석 결과 및 검토

#### 3-1. H<sub>2</sub>의 경우

앞절에서 서술한 바와같이 볼츠만수송이론을 사용하여 전자에너지분포함수를 포함한 각종 수송계수를 산출하기 위해서는 충돌단면적을 필요로한다. H<sub>2</sub>의 충돌단면적은 진동여기, 부착, 전자여기, 전리충돌단면적등을 고려하였는데 운동량변환충돌단면적은 전자에너지가 10<sup>-3</sup> [eV]에서 10<sup>2</sup>[eV]인 범위에서 결정하였으며 Gibson에<sup>10)</sup> 의해 계산된 운동량변환충돌단면적의 값과 거의 일치하고 있음을 그림 1에서 보여주고 있다. 이 그림에서 본 바와 같이 H<sub>2</sub>의 운동량변환충돌단면적이 2[eV]에서 부터 감소하는 경향을 나타내고있는데 이는 진동여기충돌이 2[eV]를 지나면서 활성화되기 때문에 전리충돌이 활성화 되는 30[eV]를 지나면서 급격히 감소하고 있다.

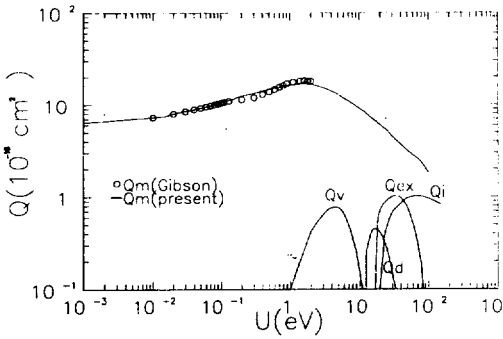


그림 1. H<sub>2</sub>의 충돌단면적  
Fig. 1. Collision Cross Sections of H<sub>2</sub>.

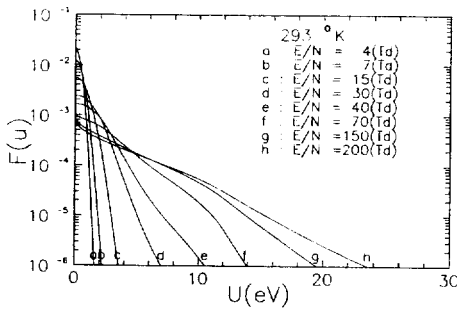


그림 2. H<sub>2</sub>의 전자에너지분포함수  
Fig. 2. Electron Energy Distribution Function in H<sub>2</sub>.

또한 그림 2에 H<sub>2</sub>의 전자에너지분포함수를 나타내었는데 식 5에서 논한 바와같이 전자에너지분포함수는 진동여기충돌, 부착충돌 및 전자여기충돌등의 비탄성충돌단면적에 반비례하므로 진동여기충돌이 활발한 범위인 2[eV]를 지나면서 급격히 하강하고 있으며 E/N의 값이 작을수록 비탄성충돌의 영향을 많이 받고 있음을 알 수 있다.

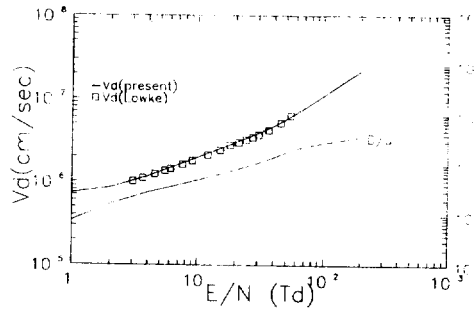


그림 3. H<sub>2</sub>의 전자이동속도 및 특성에너지  
Fig. 3. Electron Drift Velocity and characteristic Energy in H<sub>2</sub>.

그리고 그림 3에 H<sub>2</sub>의 전자이동속도와 특성 에너지를 나타내었다. 본 연구에서 결정한 각종 충돌단면적을 이용하여 계산한 전자이동속도와 j.J. Lowke에 의해 측정된 전자이동속도의 값은 거의 일치하였으며<sup>11)</sup> 아인슈타인의 관계식인  $D/\mu = KT/e$ 로 부터 온도가 293[°K]인 경우  $D/\mu = 0.02524$ 인데 그림 3에 나타난  $D/\mu$ 의 값이 0.02524보다 훨씬 큰 값을 나타내고 있으므로 본 연구의 적용범위에서 H<sub>2</sub>는 비맥스웰분포를 이루고 있다.

### 3-2. CO의 경우

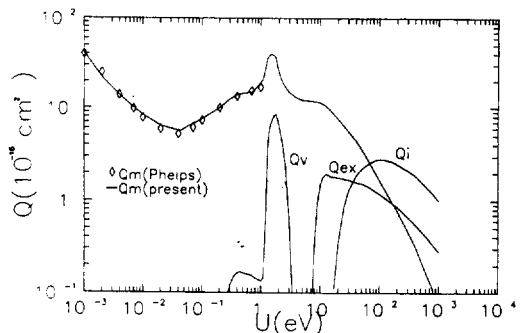


그림 4. CO의 충돌단면적  
Fig. 4. Collision Cross Sections of CO.

그림 4에 CO의 충돌단면적을 나타내었다. CO는 전자에너지가 0.0032[eV]에서 1000[eV]인 범위에서 운동량변환충돌단면적을 결정하였고 Phelps가<sup>12)</sup> 결정한 운동량변환충돌단면적의 값과 거의 일치하며 전자에너지가 1[eV]에서 2[eV]인 범위에서 운동량변환충돌이 가장 활발하며 진동여기충돌이 활성화되는 2[eV]를 지나면서 운동량변환충돌단면적은 감소하고 전리충돌이 발생하는 30[eV]를 지나면서 운동량변환충돌단면적은 급격히 감소하고 있다.

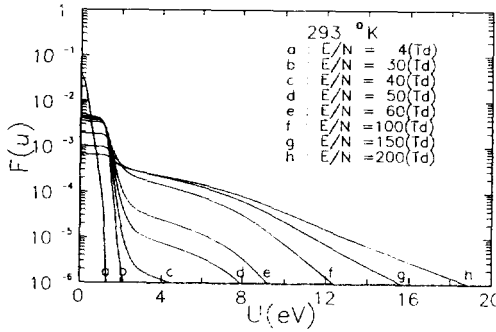


그림 5. CO의 전자에너지 분포함수  
Fig. 5. Electron Energy Distribution Function in CO.

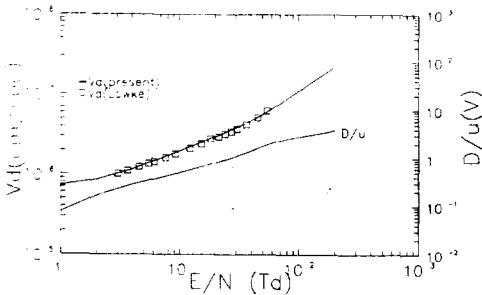


그림 6. H<sub>2</sub>의 전하이동속도 및 특성에너지  
Fig. 6. Electron Drift Velocity and Characteristic Energy in CO.

또한 그림 5에서 전자에너지분포함수를 나타내었다. 진동여기충돌이 가장 활발하게 발생하는 2[eV]에서 전자에너지분포함수는 급격히 감소하는 경향을 보이고 있다. 이는 진동여기충돌을 비롯한 비탄성충돌의 영향으로 전자의 운동에너지가 억제되는 것을 뜻한다. 그리고 그림 6에서 CO의 전하이동속도와 특성에너지를 나타내었다. 본 연구에서 결정한 충돌단면적으로 산출한 전하이동속도의 값과 Nakamura에<sup>13)</sup> 의해 측정된 전하이동속도의 값이 거의 일치하였으며 D/μ는 0.02524보다 훨씬 큰 값을 나타내므로 CO의 경우도 비맥스웰분포를 나타내고 있다.

### 3. 결 론

- 1) 상대전계의 세기는  $1 \times 10^{-17} [\text{Vcm}] \leq E/N < 200 \times 10^{-17} [\text{Vcm}]$ , 온도는 293[K]에서 H<sub>2</sub> 및 CO기체를 각각 단일기체상태로 하여, 볼츠만 방정식을 수치해석하여 운동량변환충돌단면적, 진동여기충돌단면적, 부착충돌단면적, 전자여기충돌단면적, 전리충돌단면적등을 결정하였으며, 전자에너지 분포함수 및 특성에너지를 산출하였다.
- 2) 본 연구에서 계산된 전하이동속도의 값은 H<sub>2</sub>는 J.J. Lowke의 실험치와 CO의 경우는 Nakamura의 실험치와 비교하여 일치하였다.
- 3) 충돌단면적을 이용하여 H<sub>2</sub> 및 CO기체의 전자에너지분포함수를 각각 산출하였으며 상대전계의 세기(E/N)가 증가할수록 두 기체가 모두 완만한 곡선을 이루고 있다. 즉 상대전계의 세기가 클수록 비탄성충돌의 영향

을 적게 받고 있다.

- 4) 맥스웰분포인 경우의 특성에너지의 값보다 본 연구의 특성에너지의 값이 매우 높다. 즉 두 기체 모두 非맥스웰분포를 이루고 있다.

#### 참 고 문 헌

- 1) 八田吉田：“氣體放電”，近代科學社,(1968)
- 2) 日本電氣學會 技術報告, 氣體放電シミュレーション技法(1982)
- 3) J.J. Lowke, A.V. Phelps and B.W. Irwin : *J.Appl.Phys.*, **44**(10), 4664 (1973)
- 4) Holstein : *Phys.Rev.*, **70**, (5),367 (1946)
- 5) Y. Nakamura and J. Lucas : *J.Phys.D*, **11**, 337 (1978)
- 6) L.S. Frost and A.V. Phelps : *Phys.Rev.*, **127**, (5),1621 (1962)
- 7) L.S. Frost and A.V. Phelps : *Phys. Rev.*, **136**, 64 (1964)
- 8) J. Lucas : *INT. J. Electronics*, **27**, (3), 201 (1969)
- 9) L.G.H. Huxely and R.W. Crompton : *the Diffusion and Drift of Electrons in Gases, John Wiley and Sons,Inc.* (1974)
- 10) D.K. Gibson R.W. Crompton and A.I. McIntosh : *Aust. J.Phys.*, **22**, 715 (1969)
- 11) J.J. Lowke : *Aust. J.Phys.*, **16**, 115 (1963)
- 12) R.D. Hake and A.V. Phelps : *Westinghouse Research Lab.,Sci.*, Paper 66-1E2-Gases-P1 (1966)
- 13) Y. Nakamura : *J.Phys. D*, **20**, 1/933 (1987) (1991년 3월 2일 접수)