기체 원자와 분자의 입자 측정법

전 병 훈, 김 경 호*

중부대학교 정보공학부 전기전자공학과, *삼성종합기술원 전문연구원

1. 서론

21세기 초엽에 산업계의 화두가 되고 있는 나노기술의 세계에 있어서 '나노'란 제조와 변형에 있어 원자와 분자에 기초한 산업혁명을 의미한다고 한다. 2001년 3월자의 Physical Review Letters에 발표된 플로리다 대학 과학자들의 He 3 나노뭉치의 특이한 자성특성 발견은 빠른 속도로 발전하고 있는 분야인 나노테크놀로지 발전에 큰 기여를 할 뿐만 아니라 작은 크기의 재료들이 어떤 거동을 나타내는가를 보여주는 것이 오늘날 과학계를 뒤흔들고 있는 연구주제의 하나임을 보여주고 있고, 우리가 일상생활에서 많이 접하는 재료들도 그 크기가 나노 스케일이 되면 전혀 새로운 거동을 나타내고 있음을 단적으로 보여주고 있다. 이와 같이 나노기술은 원자/분자를 제어하고 조작하여 기존과 전혀 다른 새로운 물성을 창조하는 핵심 기술이다[1].

본 논문에서는 나노기술에 필요한 기초분야라고도 할 수 있으며, 더 나아가서는 나노(nano)보다 그 스케일이 더 작은 피코(pico)나 펨토(femto) 상태의 기체 분자/원자의 전자 충돌단면적 결정에 관하여 논하고자 한다. 전자충돌 단면적이란 기체분자나 원자가 전자와 충돌하는 확률을 표시하는 량으로 각각 반응하는 것에 확률을 고려하여 환산한 기체분자/원자 1개의 크기에 상당한다. 그 값은 $10^{-16}cm^2$에 해당된다.

기체 분자/원자의 전자충돌단면적을 결정하는 방법에는 크게 단면적을 실험에 의해 직접 측정할 수 있는 전자빔 방법(Electron Beam Me thod)과 전자수송계수의 실험값과 계산값의 비교에 의해 단면적을 결정하는 전자군 방법(Electron Swarm Method)으로 구분되고 있으며, 1921년 Ramsauer에 의해 Ar원자의 전(全)충돌단면적 측정에서 처음 시작되었다. 이것은 비록 다양각색의 특성을 가진 개개의 단면적 결정법은 아니었지만 다양한 에너지 범위에서 최소와 최고 값이 존재하는 전자충돌단면적을 결정하게 되었고, 전자빔 방법의 효시가 되었다. 그리고 다음해인 1922년에 Townsend와 Bailey는 낮은 에너지 범위(<1 eV)에서 희가스를 가지고 단면적을 측정하였는데 이것이 전자군 방법의 시초라 할 수 있다. 따라서 이러한 전자충돌단면적을 결정한 시초자의 이름을 붙여 Ramsauer Townsend효과라 불려지고 있는데, 이 효과는 양자 충돌 이론의 발전과 더불어 나노 기술을 발전시키는데 있어서 큰 역할을 하고 있으며, 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 원자 나 분자 구조의 정확한 정보를 파악하여 산업기술에 응용되는 기초 자료로 이용되고 있다[2].

일반적으로 전자충돌단면적을 측정하는 방법 중 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 기체의 특성을 파악하기가 어렵고, 낮은 에너지 범위(<1 eV)에서의 측정이 불가능하여 응용범위에 이용되기가 어려운 반면, 전자군 방법은 낮은 에너지범위에서의 단면적 결정 및 개개의 특성을 가진 단면적을 결정하는 데는 이상적이나 앞에서 설명한바와 같이 실험에 의한 원자/분자 기체의 전자수송계수의 측정값과 시뮬레이션을 이용한 계산 결과와의 비교를 통해 단면적을 결정해야하기 때문에 많은 시간과 경험이 요구되어진다.

2. 전자충돌단면적의 기본 개념

전자 원자충돌의 정량적인 연구는 현재에 이르기까지 그 연구 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 본질적으로는 목적으로 하는 원자·분자의 구조에 관한 정보를 얻고, 여러 가지 충돌이론에 대한 평가를 수행하기 위한 데이터 얻음을 그 목적으로 하고 있지만, 근래에 들어 반도체, 레이저, 디스플레이 등의 산업제품분야나 상층대기 등의 환경 분야 등에 신소재 개발이나 대체 에너지 및 환경오염 물질 제거 등을 위해 개개의 특성을 가진 기체 분자

/원자의 데이터를 통한 물성 특성에 대한 요구가 늘어나면서 급속하게 진보하게 된 원인이 되고 있다. 또한, 진공기술, 하전입자의 검출과 에너지 분석, 각종 레이저 개발, 측정과 데이터 해석을 위한 컴퓨터 등 주위의 기술 발전이 보다 상세한 고정도의 실험을 가능하게 한 것도 커다란 요인으로 보고 있다[3].

위와 같이 산업제품이나 대체에너지 개발을 위해 시험이나 시작에 앞서 시뮬레이션에 이용하기 위해 이용되고 있는 단면적은 크게 세 가지로 나누어지고 있으며, 일반적으로 볼츠만방정식이나 몬테칼로 기법을 이용한 전자수송계수의 산출에는 미분단면적이 이용되고 있다.

2.1. 미분단면적

입사전자와 표적원자 사이의 상호작용의 결과 생기는 반응의 확률을 나타내는 충돌단면적은 전자의 입사 시와 산란 후의 에너지 및 산란각에 의존하고 있다. 운동에너지 E_0, 운동량 k_0의 단색으로 일정한 전자빔($N_e(m^{-2}s^{-1})$)이 z축으로 입사되고, 또 N_t개의 표적원자가 좌표 원점부근에 정지하여 놓여있다고 한다. 그리고 여기서 표적의 질량은 입사전자에 비해 크고, 실험실 좌표계와 중심좌표계가 일치한다고 한다. 전자의 입사방향에 대한 k_i의 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_i는 전자가 표적입자와 기껏 한번정도 밖에 충돌하지 않는 조건 아래에서는 N_e와 N_t는 비례하고 다음과 같은 식으로 주어진다.

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

여기서, 첨자 i는 표적입자가 충돌에 의해 i상태로 변하는 한 개의 여기과정을 나타내고, 비례계 $d^2\sigma_i(E_0, E_i, \Omega)/dE_i d\Omega$는 2중 미분단면적(DDCS, Doubly Differential Cross Section)이라 부르며, E_i에 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.

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

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

2.3. 전단면적

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

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

3. 전자충돌단면적 결정방법

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

앞에서 설명한 바와 같이 전자충돌단면적을 결정하는 방법에는 전자빔 방법과 전자군 방법으로 크게 분류되고 있으며, 본 논문에서는 본 연구실에서 행하여지고 있는 전자군 방법에 대해서만 논하고자 한다. 이전까지의 전자군 방법은 목적으로 하고 있는 순수분자/원자기체에서의 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. 그러나 본 논문에서 소개하는 전자군 방법은 다음과 같이 총 3단계에 걸쳐 목적으로 하고 있는 원자/분자기체의 전자충돌단면적을 결정한다.

단면적 결정에 앞서 우선 목적으로 하고 있는 분자/원자 기체의 초기 모델 단면적을 지금까지 보고 된 문헌 등을 참고하여 구성한다. 그리고 희가스(대부분 분자/원자 구조의 특성이 간단함.)의 대표적인 Ar가스와 최소량(10% 이하)의 목적으로 하고 있는 분자/원자기체와의 혼합기체의 전자이동속도 및 확산계수와 같은 전자수송계수를 측정하고, 시뮬레이션을 통해 그 수송계수들의 계산 값을 구한다. 구한 측정값과 계산 값과의 비교를 통해 목적으로 하고 있는 분자/원자기체의 초기 모델 단면적에서 낮은 에너지 범위(1 eV 이하)에 있는 비탄성충돌단면적 특히, 진동여기단면적을 결정한다. 여기서 혼합에 사용되는 Ar가스는 낮은 에너지 범위에 Ramsauer Townsend Minimum(RTM)을 갖고 있는 운동량변환단면적(Qm)만이 존재하므로, 측정되어지는 환산전계(E/N) 범위(~1000 Td) 내에서는 적은 량의 목적 분자기체와의 충돌 시 Ar가스의 Qm과 목적의 분자기체의 낮은 에너지 범위에 있는 진동여기단면적만이 영향을 미칠 뿐이

다. Ar가스는 현재 여러 논문들에서도 보고 되어져 있지만 그 단면적 구성이 완벽하게 구현되어 있으므로 목적으로 하는 분자기체의 낮은 에너지 범위에 있는 진동여기 단면적만을 결정할 수 있다. 다음은 목적으로 하고 있는 순수분자기체에서의 실험결과와 계산결과와의 비교를 통해 혼합기체에서 결정된 목적의 기체의 낮은 에너지 범위에 있는 진동여기단면적을 포함한 초기단면적의 수정을 가해 그 분자기체가 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. 마지막으로, 혼합기체와 순수기체에서 구해진 부착, 전리계수 및 여기계수 등의 실험결과와 계산결과의 비교를 통해 목적으로 하고 있는 분자기체의 정확한 전자충돌단면적을 결정한다.

3.1. 실험방법

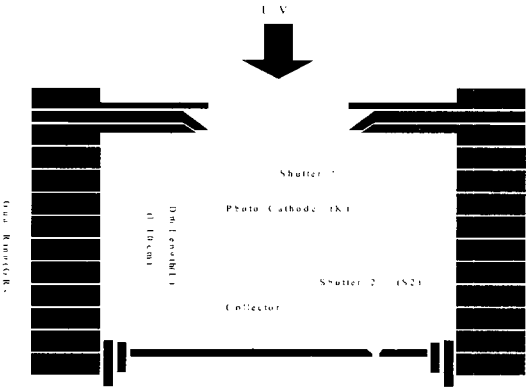

그림 1. Double Shutter Drift Tube의 구성도

전자군 방법을 이용하여 혼합기체와 순수기체에서의 전자수송계수를 측정하기 위해서는 Double Shutter Drift Tube라는 실험 장치를 이용하며, 그림 1에 그 구성도를 보여주고 있다.

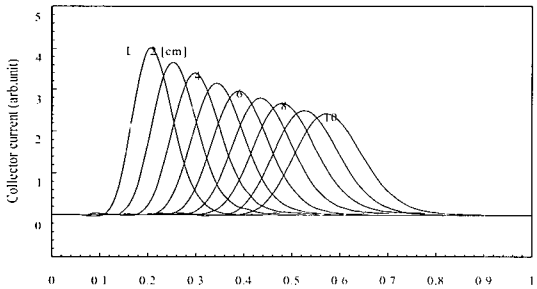

그림 2. 전자도착분포의 한 예

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 가변 할 수 있도록 하고 다이얼 게이지에 의해 조정할 수 있는 10개의 가이드링(GR)으로 구성되어 있다.

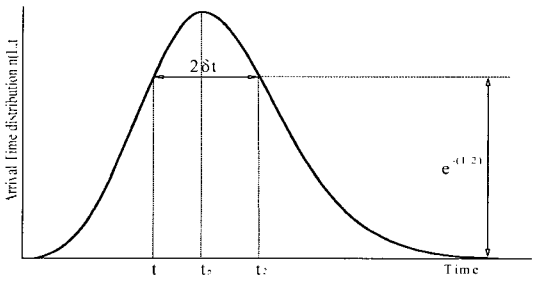

그림 3. 전자이동속도 산출 방법

또한, 콜렉터(C)는 직경 82 mm의 스테인리스 원판이고 GR은 내경 100 mm, 두께 9 mm의 스테인리스 원판으로 전자가 이동영역을 평등전계에서 이동 할 수 있도록 하였다. 측정은 TOF(Time Of Flight)법으로 하고, 상대전계(E/N), 기체 압력, 기체 온도 등의 일정한 조건에서 전극사이에 초기전자를 발생시켜 전리전류를 pico electrometer로 측정한다. 그리고 진공도와 봉입기체의 압력측정에는 전리진공계와 바라트론 메타를 이용하며, 펄스전압은 Pulse Generator에 의해 인가한다.

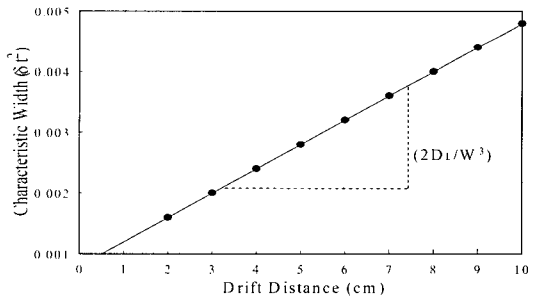

그림 4. 횡축확산계수 산출 방법

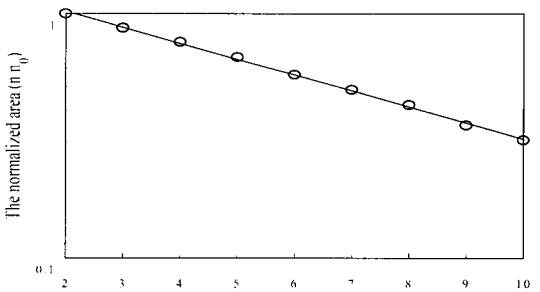

그림 5. 부착계수 산출 방법

측정에 의해 얻어지는 전자도착 시간분포의 예를 그림 2에서 보여주고, 이러한 전자도착시간분포로부터 중심도착시간과 드리프트 거리와의 관계로부터 전자이동속도를, 분포의 특성 폭과 드리프트 거리와의 관계로부터 횡축확산계수를 드리프트 거리와 전자수 밀도와의 관계로부터 부착계수의 값을 산출할 수 있으며, 각각 그림 3, 4, 5에서 그 관계를 보여주고 있다.

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 해석법[4, 5]과 몬테칼로 해석법[6]으로 구분되며, 볼츠만 방정식 해석법은 2항근사와 다항근사라는 방법으로 구분되고 있다.

볼츠만 방정식은 열평형 상태에서가 아닌 다입자계(多粒子系) 운동의 기술에 이용해 이것을 전자군의 거동 해석에 이용하고 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 짧다. 전자의 속도분포함수를 Legendre 급수로 전개하고, 그 최초의 2항에 근사하는 2항근사는 현재까지 보고 된 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.

그림6과 7은 이러한 시뮬레이션 방법을 이용하여 단면적을 결정하기 위해 이용된 전자수송계수 특히 순수 전자이동속도와 종축확산계수의 계산 결과의 예를 각각 보여주고 있고, 그림 8과 9는 이러한 전자군 방법을 이용하여 결정된 O_2분자기체와 일반적으로 혼합기체를 이용하여 목적으로 하는 분자/원자의 정확한 전자충돌단면적을 결정하기 위해 혼합가스로서 많이 이용되고 있는 Ar원자기체의 전자충돌단면적의 세트 예를 보여주고 있다.

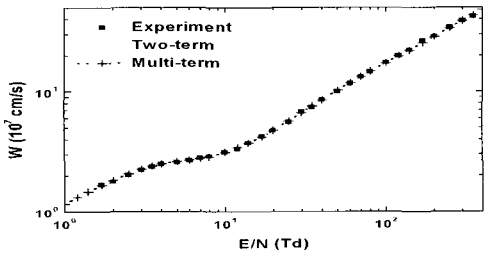

그림 6. O_2분자가스의 전자이동속도의 예

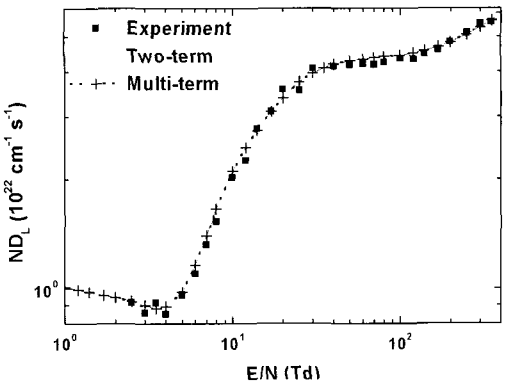

그림 7. O_2분자가스의 종축확산계수의 예

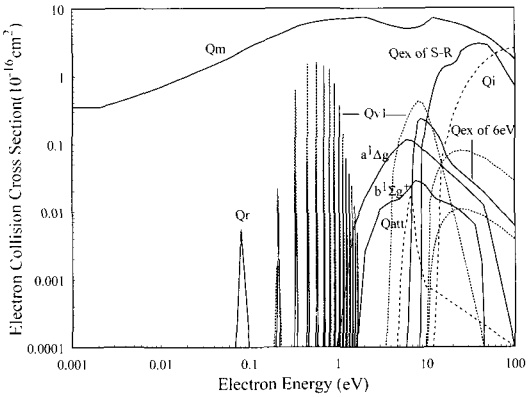

그림 8. O_2분자가스의 전자충돌단면적의 예

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.

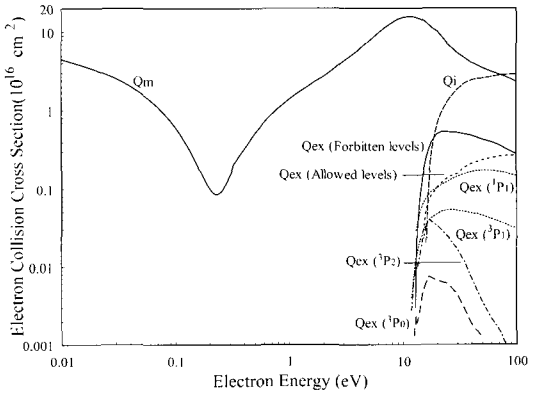

그림 9. Ar원자가스의 전자충돌단면적의 예

또한 측정결과의 정확도를 높이기 위해 측정하고자하는 한 환산전계에서 적어도 3번 이상의 압력을 가해 측정을 하고, 현재까지 보고 된 여러 논문들과 비교·검토하고 있다.

4. 결론

서론에서도 설명되어진 바와 같이 나노기술은 원자/분자를 제어하고 조작하여 기존과 전혀 다른 새로운 물성을 창조하는 신 핵심기술 산업으로서 여러 소재의 근본적이며 기초가 될 수 있는 특히 여러 기체들의 원자/분자의 전자충돌단면적 데이터가 요구되어지는 상황이다. 또한, 개개의 특성을 정량적으로 이해하려고 할 때, 또는 기체의 방전 현상을 이용하여 목적에 맞는 제품을 구성하기 위한 기체의 종류나 혼합비, 기체 압력 등의 평가를 하려고 할 때, 컴퓨터에 의한 시뮬레이션은 유력한 수단이고, 이러한 시뮬레이션이 정량적이기 위해서는 구성하는 기체와 전자와의 상호작용에 관한 지식, 특히 전자충돌단면적의 정확한 데이터와 개개의 기체원자/분자가 가지고 있는 전자수송계수의 해석은 필수 불가결한 상태이다. 이에 본 논문에서는 나노보다 그 스케일이 더 작은 전자충돌단면적에 대한 기본적인 개념과 본 연구실에서 이용되는 전자충돌단면적을 결정하는 전자군 방법(Electron Swarm Method)에 대하여 소개하였다. 이 분야가 나노기술뿐 아니라 플라즈마 및 여러 기체방전현상을 이용한 소재 개발 및 대체 에너지 개발에 도움이 되었으면 한다.

참고문헌

1. (In) *나노산업기술연구조합(www.ntra.re.kr) "나노뉴스"*
2. 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.
3. 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, pp. 2145-2150, 1998
4. H. Tagashira, Y. Sakai and S. Sakamoto, "The development of electron avalanches in argon at high E/N values", *J. Phys. D*10, 1051-1063, 1977
5. R. E. Robson and K. F. Ness, "Velocity distribution function and transport coefficients of electron swarms in gases", *Phys. Rev. A*33, 2068-2077, 1986
6. K. Satoh, M. Hataguchi, H. Itoh, Y. Sakai and H. Tagashira, "Computer simulation study of correspondence between experimental and theoretical electron drift velocities 2", *J. Phys. D*27, 1480 1486, 1994

저자소개

《전병훈》

- 1969년 2월 18일생
- 1987년 동국대학교 전기공학과 입학
- 1992년 학사학위 받음.
- 1992년 동대학원 전기공학과 방전 및 고전압 입학
- 1994년 그 분야에서 석사학위 받음.
- 1995년 일본 게이오대학 전기공학 박사과정 입학,
- 1999년 공학박사 학위 취득
- 1999~2000년까지 게이오대학 전자공학과 방문연구원
- 2000년 3월부터 현재, 중부대학교 정보공학부 전기전자공학전공 조교수

《김경호》

- 1993년 2월 경북대학교 전자공학과 (공학사)
- 1996년 3월 일본 게이오 대학 대학원 이공학연구과 Biomedical Eng. 전공 (공학석사)
- 1999년 3월 일본 게이오 대학 대학원 이공학연구과 Biomedical Eng. 전공 (공학박사)
- 현재 삼성종합기술원 BioChip-Project Team