

기체의 전자 충격에 의한 이온화에 관한 연구

김 학균
서남대학교 화학공학과

A Study on the Electron-Impact Ionization of Gases

Hag-Geum Kim

Department of Chemical Engineering, Seonam University, Seoul 590-170, Korea

서론

전자와 원자 또는 분자의 충돌에 의한 이온화는 대기 상층부 현상, 천체 물리, 환경 및 반도체 공정에 있어서 플라즈마 공정의 모델링에 있어서 중요한 요소이다.

충돌의 이온화 단면적에 대한 순 이론적 계산은 이온과 두 연속체 전자쌍간의 해를 구하는 문제이며, 원자 단위에서 연구가 활발하게 이루어지고 있다. convergent close coupling 방법¹⁾와 유사상태 R-matrix방법²⁾등의 성과가 있다. 그러나, 분자 이온화 단면적의 순 이론적인 계산은 단지 Born 근사가 이루어진 고 에너지 한계에서 이루어지고 있다. 원자나 분자의 이온화 단면적에 대한 근사 이론 모델 식은 여러 개 개발되었고, 실제적으로 잘 만들어진 반 경험적 이론 모델 식에서 좋은 값을 얻을 수 있다.

본 논문은 이온화 단면적에 대하여 정의하고, 여러 반경험적인 식들에 대하여 검토하였다. 다음 전자 2개를 가지고 있는 He 원자와 3개의 원자들로 이루어진 CO₂ 분자의 이온화 단면적을 binary encounter-Bethe model(BEB)을 사용하여 구하고 데이터와 비교해 보았다.

이론 및 고찰

A. 이온화 단면적

1) Doubly -differential cross section(DDCS)

DDCS는 다음과 같이 정의된다.

$$\frac{d^2\sigma}{dWd\Omega} = \frac{N}{N_0 n l \Delta\Omega \Delta W} \quad (1)$$

여기에서 n ; 과녁 기체 밀도, W ; 방출 전자 에너지, l ; 통과 길이, N ; 방출된 전자의 수, $\Delta\Omega$; 입체각, N_0 ; 입사 입자의 수이다.

2) Singly-differential cross section(SDCS)

에너지 분포에 따른 형

$$\frac{d\sigma}{dW} = \int \frac{d^2\sigma}{dWd\Omega} d\Omega \quad (2)$$

각 분포에 따른 형

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \int_0^{W_{\max}} \frac{d^2\sigma}{dWd\Omega} dW \quad (3)$$

여기서 $W_{\max} = T_0 - I$ 이며 W_{\max} : 방출 전자의 최대 운동에너지, T_0 : 입사 전자의 에너지, I : 이온화 포텐셜이다.

3) 전체 이온화 단면적

$$\sigma = \int_0^{W_{\max}} \int \frac{d^2\sigma}{dWd\Omega} d\Omega dW \quad (4)$$

B. 이온화 단면적 모델 식들

1) Thomson cross section

입사 전자가 원자가 전자에게 이온화 에너지와 같은 에너지를 전하는 조건을 결정한다.

$$\sigma = \pi \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{W} \left(\frac{1}{I} - \frac{1}{W} \right) \quad , \quad I: \text{이온화 에너지} \quad (5)$$

2) Rutherford cross Section³⁾

입자가 정지상태에 있는 표적 전자와 충돌을 하면.

$$\frac{d\sigma}{dW} = \left(\frac{4\pi a_0^2}{T} \right) \left(\frac{R}{W} \right)^2 \quad (6)$$

W : 방출된 전자의 운동에너지, a_0 : Bohr 반경, R : Rydberg 에너지, T : 입사전자가 상대속도를 가질 때 환산 운동에너지.

3) Mott cross section⁴⁾

두 전자 충돌시 교환을 고려하여 Rutherford 단면적을 일반화시킴.

$$\frac{d\sigma}{dW} = \left(\frac{4\pi a_0^2 R^2}{T} \right) \left[\frac{1}{W^2} - \frac{1}{W(T-W)} + \frac{1}{(T-W)^2} \right] \quad (7)$$

T : 입사 전자의 운동에너지, $T-W$: 산란 전자의 운동에너지

4) Binary-encounter cross section

Mott 단면적에 평균 운동에너지 U 을 도입. 파닉 입자의 운동량과 속도 분포를 결합시킴.

$$\frac{d\sigma}{dE} = \left(\frac{4\pi a_0^2 R^2 N}{T+U+B} \right) \left\{ \frac{1}{E^2} - \frac{1}{E(T-W)} + \frac{1}{(T-W)^2} + \frac{4U}{3} \left[\frac{1}{E^3} + \frac{1}{(T-W)^3} \right] \right\} \quad (8)$$

여기서 $U = \langle p^2 \rangle / 2m$ 는 부 껍질 전자의 운동량 연산자이다.

5) BED 식⁵⁾

Binary-encounter 이론 식과 Bethe 이론식⁶⁾을 결합함, 비율은 이온화 단면적과 정지 단면적이 고 입사 에너지 T 에서 나중의 것이 만족 되도록 하는 것으로 한다.

$$\frac{d\sigma}{dW} = \frac{S}{B(t+u+1)} \left\{ \frac{(N_i/N)-2}{t+1} \left(\frac{1}{w+1} - \frac{1}{t-w} \right) \right. \\ \left. \times \left[2 - (N_i/N) \right] \left[\frac{1}{(w+1)^2} + \frac{1}{(t-w)^2} \right] + \frac{\ln t}{N(w+1)} \frac{df(w)}{dw} \right\} \quad (9)$$

$$S = 4\pi a_0^2 N R^2 / B^2, \quad N_i = \int_0^\infty \frac{df(w)}{dw} dw, \quad t = T/B, \quad u = U/B, \quad w = W/B$$

$\frac{df(w)}{dw}$; 연속체 진동 쌍극자 강도.

6) BEB 식⁵⁾

BED식에서 $\frac{df(w)}{dw}$ 를 기저 상태에 있는 수소 원자의 이온화에 맞도록 근사시킨 형태.

$$\frac{df}{dw} = \frac{N}{(w+1)^2} \quad (10a)$$

$$\sigma = \frac{S}{(t+u+1)} \left[\frac{\ln t}{2} \left(1 - \frac{1}{t^2}\right) + 1 - \frac{1}{t} - \frac{\ln t}{t+1} \right] \quad (10b)$$

오른쪽 첫째 지수 항은 Behe 단면적의 도입부이고, 둘째 항은 Mott 단면적의 직접 과 순수 교환 부분 그리고 나머지 지수 항은 Mott 단면적의 직접과 교환간의 간섭 항이다.

7) Inokuti 식⁷⁾

이 식은 W/E의 급수를 이용해 일반화된 진동강도 뿐만 아니라 연속상의 진동강도 까지 적용되도록 구한 식이다.

$$\frac{d\sigma}{dW} = \left(\frac{4\pi a_0^2 R}{T} \right) [A(W) \ln(T/R) + B(W)] \quad (11)$$

$A(W) = (1-h)^2 \sum_n a_n h^n$, $B(W) = (1-h)^2 \sum_n b_n h^n$, $h = W/E$, a_n, b_n ; 최소 자승법 계수

8) Khare-Meath 형⁸⁾

Khare는 Born의 근사와 Moller형에 임의의 인자를 곱하고 이 두형을 더하여 다음의 식을 만들었다. 입사에너지 E에서 i번째 이온을 만드는 부분 이온화 단면적은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \sigma_i(E) = & \frac{4\pi a_0^2 R}{E} \left[\frac{E}{E-I_i} \left(M_i^2((E+I_i)/2) - \frac{R}{E} S_i(0, (E+I_i)/2) \right) \right. \\ & \times \ln \left[1 + C_i(E-I_i) \right] + \frac{R(E-I_i)}{E} S_i(0, (E+I_i)/2) \\ & \left. \times \int_0^{(E-I_i)/2} \frac{1}{(\xi^3 + \xi_0^3)} \left(\xi - \frac{\xi^2}{E-\xi} + \frac{\xi^3}{(E-\xi)^2} \right) d\xi \right] \end{aligned} \quad (12)$$

$$S_i(0, (E+I_i)/2) = \int_{I_i}^{(E+I_i)/2} \frac{df_i(w,0)}{dw} dw \quad M_i(0, (E+I_i)/2) = \int_{I_i}^{(E+I_i)/2} \frac{R}{w} \frac{df_i(w,0)}{dw} dw$$

9) Deutsch 식⁹⁾

Gryzinski형의 에너지 의존형 식을 세부적인 원자의 구조 정보와 결합한 식이다.

$$\sigma = \sum_{n,l} g_{nl} \pi (r_{nl})^2 \xi_{nl} f(u) \quad (13)$$

$$f(u) = \frac{1}{u} \left(\frac{u-1}{u+1} \right)^{3/2} \left\{ 1 + \frac{2}{3} \left(1 - \frac{1}{2u} \right) \times \ln [2.7 + (u-1)^{1/2}] \right\}$$

$u = \frac{E}{E_{i,n}}$, g_{nl} ; 가중인자-적절한 실험데이터에서 구함, $(r_{nl})^2$; 양자수 n,l 껍질의 평균제곱반경 ξ_{nl} ; n번째 부껍질의 전자의 수, E; 입사 전자의 에너지 E_{in} ; n번째 부껍질의 이온화 에너지

C. BEB식을 분자에 적용한 결과

He과 CO₂의 이온화 단면적을 구하였다. 계산 결과는 Fig. 2에 나타냈다. BED 모델은 단순한 He분자뿐만 아니라 복잡한 CO₂ 분자에도 이론 식과 실험데이터^{10,11)}가 잘 일치하였다. He에 있어서 BEB식의 오른쪽 괄호안 각항이 단면적에 미치는 영향은 각 항의 절대값 백분율로서 Fig. 1에 나타내었다. 첫째 항은 도입 에너지 T가 증가함에 따라서 증가하였고, 두 번째 항은 감소하였으며, 3번째 항은 급격히 감소하였다. 첫 항과 둘째 항의 영향이 큰 것으로 나타났다.

요약

이온화 단면적에 대하여 정리하였으며, 오래된 반경험 식에서 최근 분자의 전자껍질의 구조 및 에너지에 따른 반 경험식까지 고찰하였다. BEB식은 He과 CO₂등의 분자에서 이론식과 데이터가 아주 잘 일치하였다. BEB식의 각항이 에너지T에 따라 단면적에 미치는 영향을 알아보았다.

참고문헌

1. I. Bray, A. Stelbovics, Phys. Rev. Lett. 69, 53(1992).
2. K. Bartschat, E. Hundson, P. Scott, P. Burke, V. Burke, J. Phys. B 29, 115(1996)
3. Y.K. Kim, Radiat. Res. 61, 21(1995).
4. N.F. Mott, Proc. R. Soc. London Ser. A 126, 259(1930).
5. Y.K. Kim, M.E. Rudd, Phys. Rev. A 50, 3954(1994).
6. H. Bethe, Ann. Phys. (Leipzig) 5, 325(1930).
7. M. Inokuti, M.A. Dillon J.H. Miller, K. Omidvar, J. Chem. Phys. 87, 6967(1987).
8. S.P. Khare, W.J. Meath, J. Phys. B 20, 2101(1987).
9. H. Deutsch, C. Cornelissen, L. Cespiva, V. Bonacic-Koutecky, D. Margreiter, T.D. Mark, Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes 129, 43(1993).
10. D. Rapp and P. Englander-Golden, J. Chem. Phys., 43, 1464(1965).-CO₂
11. M.B. Shah, D.S. Elliott, P. McCallion, H.B. Gilbody, J. Phys. B 21, 2751(1988).He

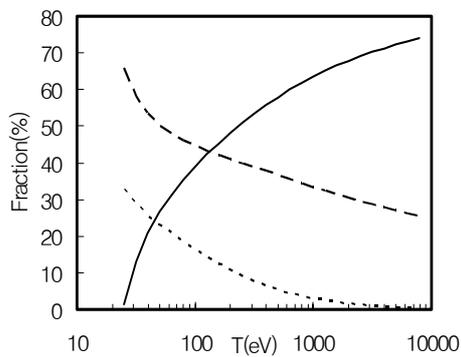


Fig. 1 Effect of each term of eq(10b) on estimation of ionization cross section. Solid curve, the first term; long-dashed curve, the 2nd term; short-dashed curve, the 3rd term.

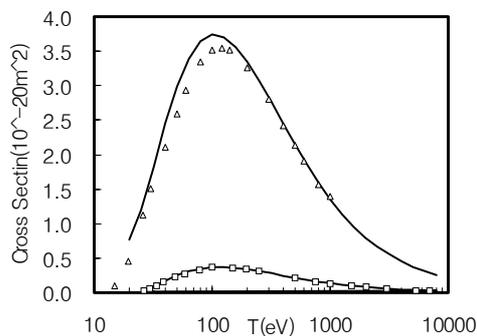


Fig. 2. Ionization cross section due to electron impact. —, the CO₂ BED cross section; Δ , experimental data by Rapp et al(Ref. 10); - - -, the He BED cross section; \square , experimental data by Shal et al(Ref. 11).