

전자충돌에 의한 Mo, W 원자의 이온화 단면적

Cross sections of Mo and W by electron impact

권덕희¹, 이용주¹, 이병철¹, Yong-Ki Kim²

¹한국원자력연구소, ²NIST(National Institute of Standards and Technology, USA)

e-mail : hkwon@kaeri.re.kr

Tokamak plasma의 내벽 물질로 내화성이 큰 molybdenium(Mo)과 tungsten(W) 금속이 사용되는 연구가 핵융합 community에서 활발히 진행되고 있다. 실제로 MIT 공대에 있는 소형 tokamak 내부에 Mo tile이 설치되어 있다. 1970년대에 플라즈마 모델링 연구에 의하면 tungsten같은 무거운 금속을 tokamak의 내벽에 장착하면 sputtering되어 나온 금속 원자가 플라즈마내의 전자와 충돌하여 이온화 되고 이온화된 금속 이온들이 충돌에 의해 여기되고 가벼운 금속에 비해 더 많은 radiative decay를 하게 된다. 이때 방출된 빛은 플라즈마를 냉각 시킬 뿐만 아니라 점화를 방해하고, 내벽 물질을 부식시켜 플라즈마내에 더 많은 불순물을 만들어 낸다. 이러한 단점에도 불구하고 tungsten이 독일이나 일본에 있는 거대한 tokamak에 특히 divertor 부분에 도입되고 있으며 ITER(International Thermonuclear Experimental Reactor)에 사용될 예정이다. 따라서 molybdenium(Mo, Z=42) 원자 및 tungsten(W, Z=74) 원자의 전자충돌 이온화 단면적은 divertor의 성능과 핵융합 플라즈마의 상태를 모델링 하는데 필수적인 자료가 된다.

Mo나 W같은 open-shell 원자의 이온화에는 두가지 주된 process가 있다. 보통 구속된 전자가 입사 전자와의 충돌로 continuum으로 바로 빠져나가는 직접적인 이온화와 자동이온화에 의한 간접적인 전자충돌에 의한 원자의 이온화에는 두가지 경로가 있을 수 있는데, 하나는 입사전자와의 충돌로 구속된 전자가 직접 continuum 상태로 빠져나가는 직접 이온화(direct ionization)와 구속된 전자가 이온화 에너지 위의 구속된 준위인 자동이온화(autoionization, AI) 준위로 여기된 후 이온화(excitation-autoionization, EA)되는 간접적인 이온화이다. AI준위는 1차 이온화 에너지 이상의 여기 에너지를 갖는 구속된 준위로 실제로 구속된 준위와 달리 continuum과 혼합되어 있어 매우 불안정한 준위로 결국에는 빛이나 전자를 방출하며 decay하게 된다. 직접 이온화 단면적은 다음의 BEB(Binary-Encounter-Bethe) model[1]을 사용하여 계산하였다.

BEB model은 PWB cross section의 asymptotic한 form과 약간 수정된 Mott cross section을 결합한 model로 어떤 empirical한 변수도 사용하지 않으며 중성 원자의 경우 다음과 같은 식으로 표현된다.

$$\sigma_{orb} = \frac{4\pi a_0^2 N(B/R)^2}{t + (u+1)/n} \left(\ln \frac{t}{2} \left(1 - \frac{1}{t^2} \right) + 1 - \frac{1}{t} - \ln \frac{t}{1+t} \right) \quad (1)$$

여기에서 a_0 는 Bohr반경을, N은 궤도에 대한 electron occupation number를, R은 Rydberg 에너지를, t는 입사전자의 에너지 T와 궤도의 결합에너지 B의 비율인 T/B를, u는 궤도 전자의 운동에너지 ($U = \langle p^2/2m \rangle$)와 결합에너지의 비율인 U/B를 나타낸다. m은 궤도의 주양자수가 2와 같거나 작을 때는 1의 값을 궤도의 주양자수가 3이상일 때는 궤도의 주양자수 n의 값을 갖는다. 위의 식 (1)에서 첫 번째 로그 항은 Bethe cross section에서 유도된 부분이며, 가운데 $1-1/t$ 항은 Mott cross section의 직접 및 순수 exchange 부분, 마지막 로그항은 Mott cross section의 직접 부분과 순수 exchange 부분의 간섭항에서 비롯된다. σ_{orb} 계산에 사용되는 B, U와 N은 오직 target 원자의 초기 상태에 대한 값 들로서, 이

이온화 에너지인 B가 간접적으로 final state와 연관이 있다는 사실을 제외하면 마지막 상태와는 무관하게 얻어진다. 직접 이온화의 총 단면적은 점유된 준위들로부터의 이온화 단면적의 합인 $\sum \sigma_{orb}$ 로 구한다. 위 식 (1)의 B, U, N은 Desclaux에 의해 개발된 상대론적 원자구조 계산 code인 MCDF(multiconfiguration Dirac-Fock)[2]을 사용하여 구하였다.

간접적인 EA 단면적은 중성 원자의 경우 BE(binding energy, excitation energy) scale된 plane wave Born(PWB) cross section을 계산하여 구하였으며 이온의 경우 E (excitation energy) scale된 Coulomb Born(CB) cross section을 계산하여 구하였다. 총 이온화 단면적은 직접 이온화 단면적과 EA의 합으로 구하였다. 이렇게 구한 Mo^+ 이온의 총이온화 단면적이 각각의 에너지 준위에 대해 다음의 그림 1에 나타나 있다. 실험측정값과 계산값이 잘 맞음을 볼 수 있다.

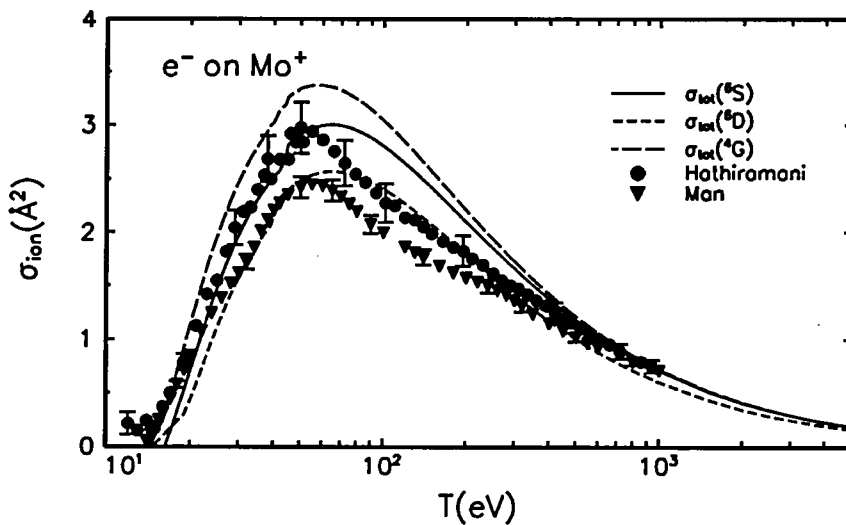


그림 1. Mo^+ 이온의 전자충돌 이온화 단면적. 원형 및 삼각 심볼은 실험 측정값을 나타낸다.

References

- [1] Y.-K. Kim and M.E. Rudd, Phys. Rev. A 50, 3954 (1994).
- [2] J. P. Desclaux, Comp. Phys. Comm. 9, 31 (1975).

T
P