

H₂ + Ar 혼합기체의 전자수송계수에서의 전자충돌 단면적

조두용, 판티란, 전병훈**
 동국대학교(서울)

Electron Collision Cross Section of Electron Transport Coefficients in Hydrogen-Argon Mixtures

Doo-Yong Jo, Phan Thi Lan, Byung-Hoon Jeon
 Dongguk University(Seoul)

Abstract - We calculated the electron transport coefficients in H₂+Ar gas calculated E/N values 0.01 ~ 1 Td by the Boltzmann equation method. This study gained the values of the electron swarm parameters such as the electron drift velocity and the transverse diffusion coefficients for H₂ +Ar gas at a range of E/N. The transport coefficient W and D/u have been calculated in mixtures of 0.5% and 4% hydrogen in argon. All values were made at 293 K.

1. 서 론

수소는 모든 에너지 자원으로부터 에너지 변환에 의해 얻을 수 있는 효율적인 에너지 변환 매체이며, 화학제품의 원료 및 화학공장의 공정가스로 널리 사용되고 있다. 그리고 현재 인류가 당면하고 있는 환경문제 및 화석연료의 가격상승이나 고갈을 예상할 때 궁극적인 미래의 대체 에너지원 또는 에너지 매체(Energy carrier)로 생각된다. 수소는 현재의 석탄, 석유, 천연가스등의 에너지원을 대신하게 될 것이다.[1] 이런 수소의 이용은 수소연료전지, 핵융합, 반도체 공정 등에 많이 쓰이고 있다.

수소가 일상생활에 보다 쉽게 이용되기 위해서는 수소저장 기술이 개발되어야 한다. 현재 수소저장방법에는 크게 고압수소기체저장, 액체 수소 저장, 수소흡착물질에 의한 수소 저장 방식 등이 있다. 이 중에서 수소 흡착물질에 의한 수소 저장 방식은 금속 표면에 수소가 흡착-탈착 반응을 일으킴으로 수소를 저장하는 기술이다. 이러한 흡착-탈착 현상을 기체 분자의 운동에너지와 온도, 압력, 분자 수 등의 값과 관계가 있다. 수소저장 기술 뿐 아니라 수소가 쓰이는 곳에서 수소의 큰 폭발성으로 인해 직접적인 실험은 어렵다. 따라서 시뮬레이션에 의해 여러 조건 상황에 따른 물성적 특성을 파악할 필요가 있으며, 이러한 시뮬레이션을 위해서는 수소가 가지고 있는 전자충돌단면적의 데이터가 요구되어진다. 그러나 아직까지 수소를 이용한 정확한 물성적 특성을 해석하기 위한 데이터가 없으므로 이에 따른 연구를 하고자 한다.

Park의 논문[2]에서 부착, 전리 단면적을 고려한 수소의 전자충돌 단면적 세트를 2항 근사 볼츠만 방정식에 의한 전자군 방법으로 구성하였다. 본 논문에서는 Park의 수정된 수소 충돌단면적을 이용하여 Ar 가스와 목적으로 하고 있는 수소분자가스와의 혼합가스에서 전자수송계수(이동속도, 횡방향 확산계수)를 시뮬레이션으로 구해 Haddad and Crompton[3]의 실험값과 비교해 보고자 한다. 수소분자와 Ar의 전자충돌 단면적을 이용하여 E/N = 0.01 ~ 1.0 Td에서 볼츠만 2항 근사법에 의해 0.5%와 4%의 H₂ -Ar 혼합가스에서의 전자수송계수를 계산하였다.

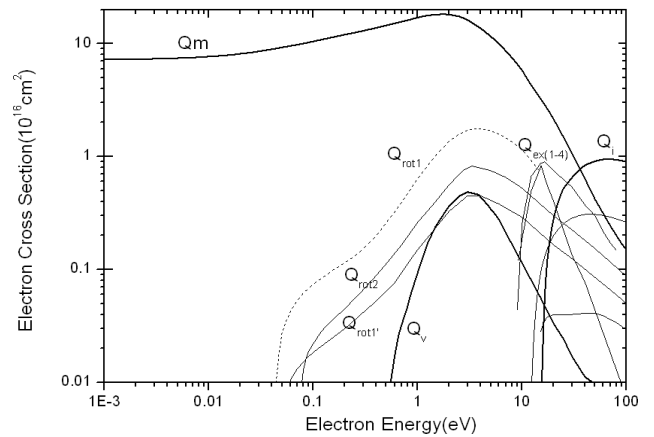
2. 시뮬레이션

기체는 보통 상태에서는 전기적으로 중성을 유지하지만 전계를 가하거나 온도가 상승하면 충돌현상이 일어나게 된다. 전자, 이온 등의 하전 입자와 원자, 분자 등의 입자들은 충돌하면서 각각은 크기와 방향이 다른 속도를 갖게 되고 또한 불규칙한 운동을 하게 된다. 이러한 기체 중의 특성을 파악하기 위해 각 입자들 간의 충돌현상(전리, 여기, 해리 등)을 이해해야 한다.

본 연구에서는 개개의 전자를 추적하는 방법이 아닌 다수의 입자를 통계적으로 해석하여 계의 단순한 성질을 도출해 낼 수 있는 볼츠만 방정식을 이용하여 해석하려고 한다. 위치와 속도를 가지는 전자 수밀도가 위치변화 하는 경우, 전계에 의한 속도변화 하는 경우, 그리고 충돌에 의한 속도변화가 일어나는 경우를 분포함수로 나타낸 것이 볼츠만 방정식이다.[4] 2항근사 볼츠만 방정정식을 이용한 시뮬레이션을 통해 계산한 값을 실험값과 비교하였다. 시뮬레이션은 수소와 Ar의 각 단면적(운동량변환단면적, 여기, 해리, 부착 단면적 등)들을 데이터화 하여 각각의 E/N에 따른 Max Energy를 입력한다. 그리고 수천 번(5000회) 추적하는 것으로 설정하여 만족할 값이 나올 때까지 반복 수행하였다.

3. 전자 충돌 단면적

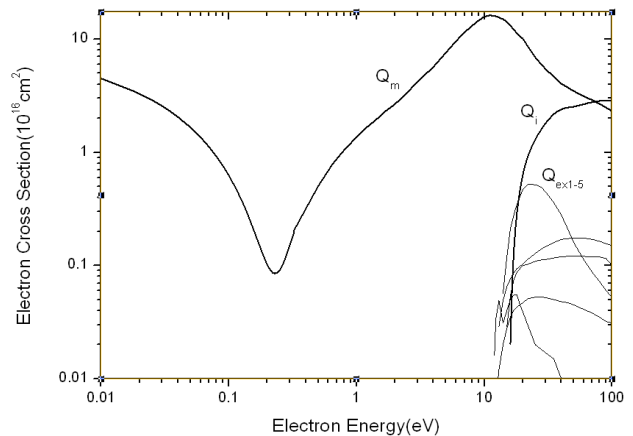
3.1 H₂ 전자충돌 단면적(Total Cross sections)



<그림 1> H₂의 전자충돌단면적

그림1에서는 본 연구를 수행하기 위해 이용한 초기단면적과 H₂ -Ar 혼합기체를 이용하여 결정된 수정단면적을 보여주었다. 초기단면적은 운동량변환단면적, 회전여기, 진동여기단면적, 해리단면적, 부착단면적, 진동여기단면적으로 구성되어 있다. Qatt는 기존의 Buckman and Phelps의 전자충돌단면적에서는 제외되었지만 본 논문에서는 Drexel et al의 Beam 방법을 이용한 부착단면적으로 구성하였다. 그리고 수정된 수소의 전자충돌면적은 Park[2]의 단면적을 이용하였다. Park의 단면적은 낮은 에너지 범위에서 영향이 큰 Qrot에 대한 수정을 하였다. Threshold 값을 수정하여 비교한 뒤 오차가 적은 값을 토대로 여러 번 시뮬레이션 하여서 수정된 전자충돌 단면적세트를 보여준다.

3.2 Ar의 전자충돌 단면적



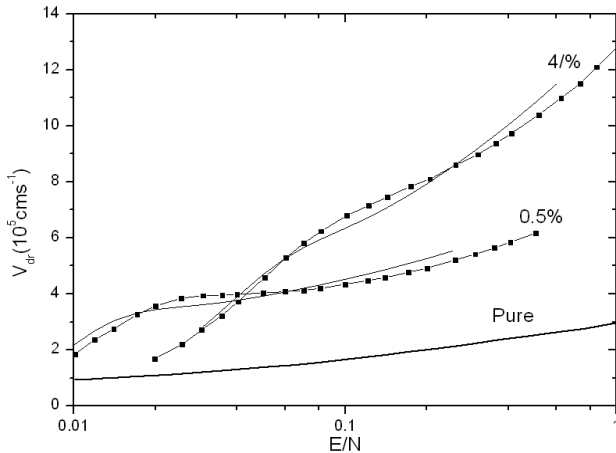
<그림 2> Ar 전자충돌 단면적

혼합가스로 이용한 Ar의 전자충돌단면적을 그림2에 나타내었다. Ar가스의 단면적 구성은 비교적 간단하고 많은 연구로 측정된 데이터가 존

제하여 혼합가스의 특성을 알기 위해 많이 사용되고 있다. Ar가스는 낮은 에너지 영역에서 운동량 변환 단면적(Q_m)만이 존재하고, 10eV 이상에서 여기단면적(Q_{ex}), 전리단면적(Q_i)으로 구성되어 있기 때문에 적은양의 가스와 충돌했을 경우, Ar가스의 Q_m 과 충돌한 가스의 낮은 에너지 범위에 있는 진동여기단면적이 영향을 미치게 된다.[6] 운동량변환 단면적은 K. L. Bell, N. S. Scott 이 계산한 값[7] 과 Nakamura and Kurachi[8] 의 데이터를 사용하였다.

4. H₂ + Ar 의 전자수송계수

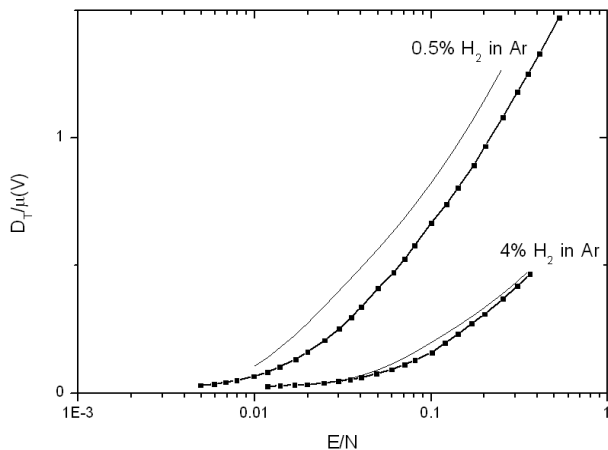
4.1 전자 이동 속도 (Electron Drift Velocity)



〈그림 3〉 H₂ +Ar 혼합가스에서의 전자 이동속도 비교

그림 3에서는 순수 Ar가스에 소량의 수소분자가스를 혼합하였을 때 전자이동속도를 실험결과를 도형으로, 시뮬레이션 결과는 실선으로 표시하여 어떻게 변하는 지를 보여주고 있다. E/N = 0.01 ~ 1. Td 영역에서 수소분자를 0.5%, 4% 혼합했을 때의 이동속도 값은 Haddad and Crompton [3]이 실험한 값을 이용하였고, 전자군 볼츠만 시뮬레이션 계산 결과와 비교하였다. 그림에서 보듯이 0.5% 경우 E/N = 0.03 ~ 0.06 구간에서, 4% 경우 E/N = 0.08~0.1 구간에서 E/N 이 증가함에 따라 이동속도의 기울기가 감소하는 현상이 보인다. 그림 1과 그림 2의 수소분자, Ar 각각의 단면적을 보았을 때 비슷한 영역에서 Ar의 운동량변환단면적과 수소분자의 진동여기단면적에 의한 영향으로 이 현상이 나타난다고 볼 수 있다.

4.1 횡방향 특성에너지(D_t/u)



〈그림 4〉 H₂ +Ar 혼합가스에서의 횡방향 특성에너지

그림 4는 횡방향 확산계수와 이동도의 비(D_t/u)를 E/N =0.01 ~ 1 Td 영역에서 실험값은 Haddad and Crompton [3]의 데이터를 도형으로 시뮬레이션 계산 값은 실선으로 나타낸 것이다. 순수 Ar에서 가장 큰 값이 나타나고 0.5% 보다 4% 혼합비에서 작은 횡방향 특성에너지를 가지며, E/N 이 높을수록 기울기가 급격해지는 것을 볼 수 있다. E/N 의 범위가 1Td 이하로 낮은 범위이므로 전체의 횡방향 에너지 특성은 다수의 합량인 Ar의 운동량변환단면적(Q_m)과 수소가스의 낮은 에너지 범위에 있는 비탄성충돌단면적인 진동여기단면적(Q_{rot})에 영향을 받고 있음을

보여주며, 그 결과는 W와 유사한 결과를 보이고 있다. 실험값을 통해서 횡방향 특성에너지는 E/N에 의존하는 특징이 있다고 알 수 있다.[9] 4%에 비해 0.5% 일 때의 횡방향 특성에너지가 오차범위가 더 크게 나타나는 것은 그림 3에서 보듯이 E/N = 0.01 ~ 0.08 부분에서 이동속도(W) 값이 일치하지 않는 것 때문으로 생각된다. 실험데이터와의 오차를 줄이기 위해 낮은 에너지 영역에서 수소의 단면적에 대한 수정이 요구되어진다.

3. 결 론

현대사회에서 관심과 사용이 증가하고 있는 수소가스를 시뮬레이션을 통해서 전자수송계수를 비교하여 보았다. 기존에 수소가스의 단면적을 정리한 Yoon et al의 자료와 수정을 통해 보완된 Park 의 단면적을 이용하여 Ar가스에 0.5%, 4%의 수소가스를 혼합하여 전자이동속도와 횡속확산계수에 대한 특성에너지를 실험값과 비교하였다.

전자이동속도는 E/N = 0.03 ~ 0.06 구간에서 속도의 증가 폭이 감소하였고, 횡방향 특성에너지는 혼합비가 높아질수록 에너지 값이 줄어드는 현상과 E/N에 영향을 받는 것을 확인하였다.

실험값의 범위가 작아서 보다 넓은 범위에서의 해석이 되지 못한 부분과 시뮬레이션으로 나온 데이터가 실험값과 오차가 큰 것을 앞으로 보완을 통해 줄여 나가기 위해 수소가스와 Ar의 단면적에 대한 수정이 요구되어진다.

갈수록 증가하는 수소의 사용에 있어서 수소 단면적을 보다 정확하게 데이터화 하는 것은 수소연료전지나 핵융합, 수소저장 등 여러 분야에서 이용될 때 도움이 될 것은 분명하다.

[참 고 문 헌]

- [1] J. S. Lee, "Effect of electrostatic field and pore structure of zeolites on the low-temperature adsorption of hydrogen", Chungnam National University, 2008
- [2] E. J. Park, "볼츠만 방정식을 이용한 H2의 전자충돌단면적 결정", Dongguk University, 2010
- [3] G. N. Haddad and R. W. Crompton, "Electron Transport in Argon-Hydrogen Mixtures", Aust. J. Phys., Vol 33, 975-83, 1980
- [4] S. C. Ha and K. S. Moon, "Analysis of electron swarm parameter and the electron energy distribution function in CH4 plasma", 산업기술논문집, Vol 11, 1998
- [5] J. S. Yoon, M. Y. Song et al, "Cross sections for electron collisions with hydrogen molecules", J.Phys. Chem. Ref. Data., Vol. 37, No. 2, pp.913-931, 2003
- [6] 전병훈, 하성철, "전자군 방법에 의한 전자충돌단면적 결정", 전기전자재료학회논문지, Vol. 16, No. 5, p435, 2003
- [7] K. L. Bell, N. S. Scott, and M. A. Lennon, "The scattering of low-energy electrons by argon atoms", J.phys. B: At. Mol. Phys. 17, P. 4757, 1984
- [8] Nakamura Y and Kurachi M, "Electron Transport Parameters in Argon and its Momentum Transfer Cross Section", J. Phys. D, Vol. 21, pp. 718-723, 1988
- [9] 하성철, 전병훈, "볼츠만 방정식과 몬테칼로법에 의한 SiH4-Ar 혼합가스의 전자수송계수에 관한 연구", 전기전자재료학회논문지, Vol 14, no.2, pp.169-174, 2001