

## H<sub>2</sub>의 전자 수송 계수에 관한 연구

박은주\*, 전병훈\*  
 동국대학교 전기공학과\*

### A Study on the Electron Transport Coefficients in Hydrogen Molecular

Eun-Joo, Park\*, Byung Hoon, Jeon\*  
 Department of Electrical Engineering, University of Dongguk\*

**Abstract** - The electron transport coefficients in hydrogen molecular is calculated over the range of E/N values from 0.01 to 300 Td and at temperature state of 77K, 293K and 300K by Boltzmann equation method. The results gained that the values of the electron transport coefficients such as the electron drift velocity, the electron ionization coefficients, longitudinal diffusion coefficients consisted with the results of measured and calculated for a range of E/N.

#### 1. 서 론

수소는 석유화학공정, 암모니아 제조, 메탄올 제조, 지방산과 유류의 수소화, 합금과 반도체 산업의 환원공정 등 화학공업에서 널리 사용되고 있다. 최근 석유, 석탄, 천연가스 등 화석연료의 지속적인 사용증가에 따른 환경공해와 지구온난화 문제를 해결하는 방안으로, 또한 화석 연료의 고갈에 대비한 미래의 대체에너지원으로 청정에너지의 개발이 요구되고 있으며, 이에 적합한 에너지 매체로 수소가 주목을 받고 있다. 이와 같이 수소의 많은 이용에도 불구하고 전계 인가 시에 수소기체의 전자의 이동, 확산, 충돌, 부착현상에 대한 연구결과 및 그 전자충돌단면적에 대해 보고된 것이 전무한 상태이다.

본 연구에서는 최근 보고된 자료를 토대로 한 전자충돌단면적[1]을 이용하여 전자기동속도, 종방향 확산 계수, 전리계수에 관한 수소의 전자 수송계수에 관한 물성적 특성을 2항 근사 볼츠만 방정식을 이용하여 계산하려고 한다. 또한 과거 시뮬레이션 값과 실험값을 비교함으로써 본 연구의 시뮬레이션 데이터의 정확성과 온도변화에 따른 물성적 특성을 밝힐 수 있다. 본 연구 자료를 토대로 얻어진 물성적 데이터는 수소 에너지 그리고 수소와 관련된 기초자료로 많이 이용될 것으로 판단된다.

#### 2. 본 론

##### 2.1 2항 근사 볼츠만 방정식

기체하전입자군의 수송계수를 측정하는 방법에는 2항 근사와 다항근사 볼츠만 방정식 해법, 몬테카를로 시뮬레이션 기법과 같이 3가지 방법이 있다. 본 연구에서 TOF(Time Of Flight) 샘플링 방법을 이용하여 가스의 전자수송계수들을 산출하는 데 이용한 2항 근사 볼츠만 방정식은 열평형 상태에서가 아닌 다입자계 운동의 기술에 이용해 이것을 전자군의 거동해석에 이용하고 있다. 볼츠만 방정식에서는 전자의 거동을 분포함수라는 거시적인 형태로 표시하고, 이 분포함수에서 전자수송계수를 산출한다. 2항 근사 볼츠만 방정식은 전자의 속도분포함수를 Legendre 급수로 전개하고 그 최초의 2항에 근사하는 2항 근사는 전자수송계수를 산출하기 위한 짧은 소요시간이라는 장점과 전자의 속도분포함수에 비등방성이 강한 경우에 정확한 계수를 산출할 수 없는 단점을 가지고 있다.

최초의 전자의 연속식은 Thomas[2]에 의해 식(2-1)로 주어졌고,

$$\frac{\partial n(z,t)}{\partial t} = R_i(z,t)n(z,t) - \frac{\partial}{\partial z} W(z,t)n(z,t) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} D(z,t)n(z,t) \quad (2-1)$$

여기서 전자의 전리 및 부착충돌을 고려한 전자의 연속식은 Tagashira[3]에 의해 식(2-2)로 나타내며, 역변환에 의해 식(2-3)을 얻을 수 있다. 여기서  $n(\epsilon, z, t)$ 는 전자에너지분포함수이다.

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^\epsilon n(\epsilon', z, t) d\epsilon' = R_C + R_E + R_z \quad (2-2)$$

$$\begin{aligned} n(\epsilon, z, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(isz) \exp(-\omega(s)t) H(\epsilon, s) \\ &= (F_0 + F_1 \frac{\partial}{\partial z} + F_2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \dots) \times [\exp(\sum_{k=3}^{\infty} (-1)^k \omega_k t \frac{\partial^k}{\partial z^k})] \\ &\times \exp(\omega_0 t) \left[ \frac{1}{(4\pi\omega_2 t)^{1/2}} \exp(-\frac{(z-\omega_1 t)^2}{4\omega_2 t}) \right] \end{aligned} \quad (2-3)$$

식 (2-1)~(2-3)으로부터 시간  $t$ 에 의해 각각의 전자수송계수는 다음과 같이 구할 수 있다.

<전자이동속도>

$$W_r = \frac{\partial z'(t)}{\partial t} = -\frac{V_1 E}{3N} \int_0^\infty \frac{\epsilon}{Q_T} \frac{\partial}{\partial \epsilon} (F_0 \epsilon^{-1/2}) d\epsilon + (\omega_0 A_1 - \omega_{01}) \quad (2-4)$$

<종축확산계수>

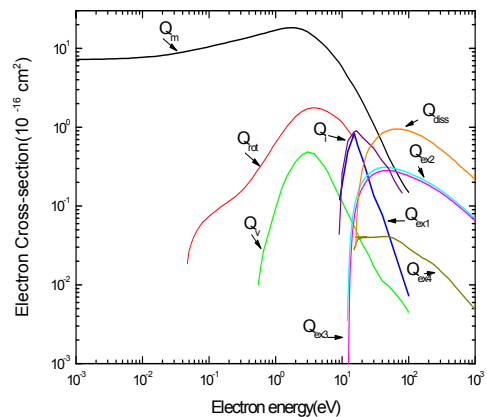
$$\begin{aligned} D_L &= \frac{1}{2!} \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} [z - z'(t)]^2 p(z, t) dz = \frac{V_1}{3N} \times \\ &\left( E \int_0^\infty \frac{\epsilon}{Q_T} \frac{\partial}{\partial \epsilon} (F_1 \epsilon^{-1/2}) d\epsilon + \int_0^\infty \frac{\epsilon^{1/2}}{Q_T} F_0 d\epsilon \right) \end{aligned} \quad (2-5)$$

<전리계수>

$$\alpha = \frac{\nu_\alpha}{W_r} \quad (2-6)$$

##### 2.2 전자 충돌 단면적

본 연구에서 이용한 H<sub>2</sub>의 전자충돌 단면적은 <그림 1>에서 보여주고 있으며 운동량변환단면적(Q<sub>m</sub>), 여기단면적(Q<sub>ex</sub>), 전리단면적(Q<sub>i</sub>)으로 구성하고 있다. 운동량변환단면적(Q<sub>m</sub>)은 2 eV이하에서는 swarm실험에 의한 Schmidt[4]의 실험값을 사용하였고 2 eV이상에서는 Elford[5]의 beam-type 실험값을 사용하였다. 이외에 회전여기단면적(Q<sub>rot</sub>)과 진동여기단면적(Q<sub>v</sub>)은 England[6]의 swarm 실험에 의한 실험값을 사용하였다. 여기단면적(Q<sub>ex1</sub>, Q<sub>ex2</sub>, Q<sub>ex3</sub>, Q<sub>ex4</sub>)은 Khakoo[7]은 Liu[8] 그리고 Wrikich[9]의 EELS 측정값을 사용하였다. 해리단면적(Q<sub>diss</sub>)은 Corrigan[10]에 의한 실험값을 사용하였다. 전리단면적(Q<sub>i</sub>)은 Rapp[11]에 의한 실험값을 사용하였다.



<그림 1> H<sub>2</sub>가스의 전자충돌단면적

##### 2.3 결과 및 고찰

###### 2.3.1 전자기동속도

<그림 2>에서 보는 바와 같이 본 연구의 2항 볼츠만 방정식에 의한 결과값은 E/N의 값이 증가함에 따라 전자기동속도(W)는 선형적으로 모는 그래프가 증가한다. Huxley[13] 실험값과 본 연구의 결과값의 차이가 오차범위 5%안의 결과를 나타내는 것으로 보아 본 연구의 전자기동속도(W)값이 실제 값에 가깝다는 것을 알 수 있다. 이와 달리 Buckman[12]의 계산 결과값과는 10 Td이하에서 많은 오차를 보이고 있다. 이는 Buckman[12]의 전자충돌단면적과 본 연구에서 이용한 단면적중 회전여기(Rotational Excitation, Q<sub>rot</sub>) 단면적의 문턱 전압의 차이 때문이라고 판단된다.

본 연구의 결과값(300K)과 Huxley[13]의 실험값(77K, 293K)을 비교해 볼 때 그래프의 형태가 같음을 보일 수 있다. 이를 통해 온도에 따른 H<sub>2</sub>의 온도에 대한 의존성이 보이지 않음을 알 수 있다.

### 3. 결 론

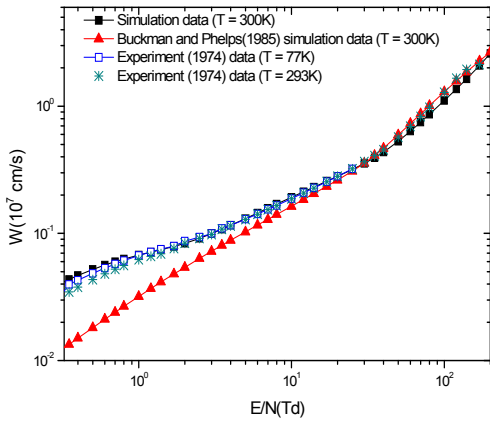
2항 근사 볼츠만 방정식을 이용하여  $0.01 \leq E/N(\text{Td}) \leq 300$  범위에서  $\text{H}_2$ 의 기체 전자수송계수의 특성을 최근 전자충돌단면적 데이터를 이용하여 계산하였다. 본 연구에서의 결과값과 실험값, 예전 전자충돌단면적 데이터 계산 결과값을 비교분석하였다. 그 결과 예전 데이터 결과값은 실험값과 많은 오차를 보이지만 본 연구의 데이터 결과값은 실험값과 흡사함을 볼 수 있었다. 이를 통해 본 연구의 데이터 결과값이 예전 데이터 결과값보다 정확함을 알 수 있었다.

하지만 낮은 에너지 범위에서의 종방향 확산계수는 본 연구의 결과값과 실험값을 비교했을 때 오차가 나타났다. 이는 비탄성충돌단면적의 실험값들이 실험의 종류가 달라짐에 따라 데이터값이 부정확해지거나 혹은 데이터 자료의 부족으로 인하여 많은 수정에도 불구하고 부정확한 데이터를 나타내고 있기 때문이다. 앞으로 데이터의 수정과 새로운 데이터에 대한 연구가 필요함을 알 수 있다.

또한 전자기동속도와 종방향 확산계수를 77K, 293K, 200K 온도에 따라 비교했을 때 E/N값이 증가함에 따라 같은 형태의 그래프가 나타났다. 이를 통해 온도에 따라 영향을 받는 다른 기체들의 비해  $\text{H}_2$ 는 온도와 무관하게 이용 가능함을 알 수 있었다.

### [참 고 문 헌]

- [1] J. S. Yoon, M. Y. Song, J. M. Han, S. H. Hwang, W. S. Chang, B. J. Lee and Y. Itikawa, "Cross Section for Electron Collisions with Hydrogen Molecules", J. Phys. Chem. Ref. Data, Vol. 37, No. 2 2008
- [2] W. R. L. Thomas, "The determination of the total excitation cross section in neon by comparison of theoretical and experimental values of Townsend's primary ionization coefficient" J. Phys., Vol. B2, p 551, 1969
- [3] H. Tagashira, Y. Sakai and S. Sakamoto, "The development of electron avalanches in argon at high E/N values : II. Boltzman equation analysis", J. Phys., Vol. D10, p 1051, 1977
- [4] B. Schmidt, K. Berkhan, B. Götz and M. Müller, "New experimental techniques in the study of electron swarms in gases and their impact on the determination of low energy electron scattering cross sections", Phys. Scr., T 53, 30, 1994
- [5] M. T. Elford, S. J. Buckman, and M. J. Brugger, "In photon and Electron Interactions with Atoms, Molecules and Ions, Landolt-Börnstein", New Series, Group I, Vol. 17, 2003
- [6] J. P. England, M. T. Elford, and R. W. Crompton, "A study of the vibrational excitation of H/sub 2/ by measurements of the drift velocity of electrons in H/sub 2/-Ne mixtures", J. Phys. vol. 41, p 573-586, 1988
- [7] M. A. Khakoo and J. Segura, "Differential cross sections for the electron impact excitation of the  $b^3\sigma_u^+$  continuum of molecular hydrogen", J. Phys. B 27, p 2355-2368. 1994
- [8] X. Liu, D. E. Shemansky, S. M. Ahmed, G. K. James, and J. M. Ajello, "Electron-impact excitation and emission cross sections of the  $\text{H}_2$  Lyman and Werner Systems", J. Geophys. Res. 103, p 26,739-26,758, 1998
- [9] J. Wriekich, D. Mathews, I. Kanik, S. Trajmar, and M. A. Khakoo, " Differential cross-sections for the electron impact excitation of the  $B^1\Sigma_u^+$ ,  $c^1\Sigma_u^+$ ,  $a^3\Sigma_u^+$ ,  $C^1\Pi_u$ ,  $E^1\Sigma_u^+$  and  $e^3\Sigma_u^+$  states of molecular hydrogen", J. Phys vol. 35, p4695-4709, 2002
- [10] S. J. B. Corrigan, "Dissociation of molecular hydrogen by electron impact", J. Chem. Phys. vol. 43, p4381-4386, 1965
- [11] D. Rapp and P. Englender-Golden, "Cross sections for dissociative ionization of molecules by electron impact", J. Chem. Phys. vol. 43, p 1464-4065, 1965
- [11] Buckman and Phelps, "Vibrational excitation of D2 by low energy electrons", J. Chem. Phys. vol. 82, p4999, 1985
- [12] L. G. H. Huxley, R. W. Crompton, "The diffusion and drift of electrons in gases", Simultaneously, p615 - 617, 1974

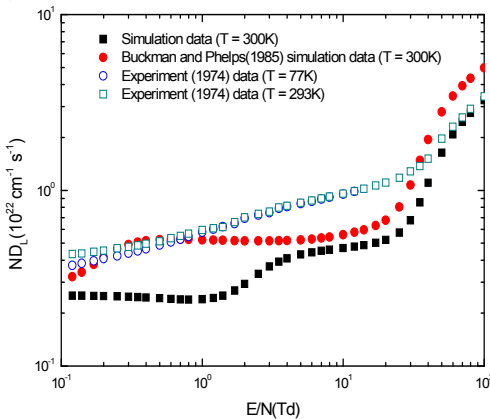


<그림 2>  $\text{H}_2$ 가스의 전자기동속도

#### 2.3.2 종방향 확산계수

<그림 3>에서 보는 바와 같이 L. G. H. Huxley[13] 실험값은 E/N이 증가함에 따라 종방향 확산계수( $\text{ND}_L$ )는 열평형 상태를 나타내고 있다. 본 연구의 결과값은 Buckman[12]의 계산에 의한 결과값과 많은 오차를 나타낸다. 앞서 10 Td이하의 전자기동속도(W)의 차이와 마찬가지로 종방향 확산계수( $\text{ND}_L$ )도 회전 여기(Rotational Excitation,  $Q_{rot}$ ) 단면적의 문턱 전압값의 차이로 판단된다.

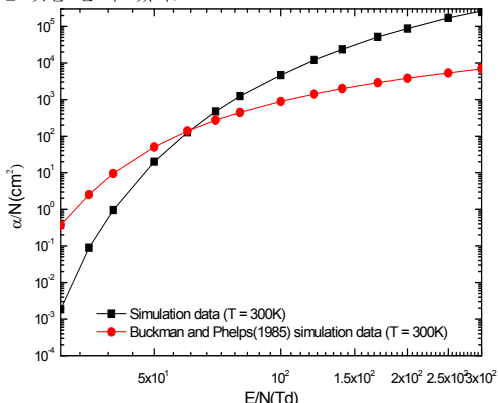
종방향 확산계수( $\text{ND}_L$ )의 계산값은 실험값과 많은 오차를 보이고 있다. 이는 본 연구에서 이용된  $\text{H}_2$ 의 단면적 세트가 시뮬레이션에 하기엔 아직 불안정한 상태라 볼 수 있다. 또한 Huxley[13] 실험값 77K, 293K를 비교해보면 온도에 따른 종방향 확산계수( $\text{ND}_L$ )의 의존성은 보이지 않고 있다.



<그림 3>  $\text{H}_2$ 가스의 종방향확산계수

#### 2.3.2 전리계수

<그림 4>는  $\text{H}_2$ 에 대한 전리계수의 실험값이 없기 때문에 본 연구의 결과값과 Buckman[12]의 계산 결과값을 비교하였다. <그림 4>에서 보는 바와 같이 두 결과값은 처음 E/N의 75 Td이하의 구간에서는 E/N의 증가에 따라서 전리계수( $\alpha/N$ )의 크게 증가됨을 볼 수 있다. 이는 전리가 일어날 확률은 E/N이 크게 되면 오히려 저하되는데 충돌시 상호작용을 할 시간이 짧기 때문에 전리하기가 어려워지기 때문이라고 보여진다. 본 연구의 결과값에서는 20 Td이하에서는 전리가 일어나지 않았다. 또한 본 연구의 결과값의 변화추이에 비해 Buckman[12]의 계산 결과값의 변화가 작은 것을 알 수 있다.



<그림 4>  $\text{H}_2$ 가스의 전리계수