

MCS - BEq에 의한 SF₆-Ar혼합기체의 확산계수Diffusion Coefficients for Electrons in SF₆-Ar Gas Mixtures by MCS-BEq김 상 남[†]
(Sang-Nam Kim)

Abstract - Energy distribution function for electrons in SF₆-Ar mixtures gas used by MCS-BEq algorithm has been analysed over the E/N range 30~300[Td] by a two term Boltzmann equation and a Monte Carlo Simulation using a set of electron cross sections determined by other authors experimentally the electron swarm parameters for 0.2[%] and 0.5[%] SF₆-Ar mixtures were measured by time-of-flight(TOF) method, The results show that the deduced longitudinal diffusion coefficients and transverse diffusion coefficients agree reasonably well with theoretical for a rang of E/N values. The results obtained from Boltzmann equation method and Monte Carlo simulation have been compared with present and previously obtained data and respective set of electron collision cross sections of the molecules.

Key Words : Distribution function, Collision cross sections, Monte Carlo Simulation(MCS), Boltzmann equation (BEq)

1. 서 론

최근 국내외적으로 고도 산업과 경제 성장으로 전력 수요가 매년 증가하는 실정이다. 따라서 전력 전송의 고전압화, 대용량화 및 핵융합 등의 새로운 에너지 기술개발의 기초 과학 연구가 다각적으로 활발히 이루어지고 있는 추세이다. 한편 산업 발전에 따라 전력 계통의 대용량화, 송전 전압의 초고압화에 의하여 각종 전기 기기에 방전 현상이 중대한 영향을 미치게 되고 환경문제 등 여러 산업 분야에서 방전을 이용하려는 노력이 증가하고 있다. 따라서 기체 방전을 지배하는 Mechanism을 정확히 이해할 필요가 있으며 이를 위하여 이론적, 실험적 수치 해석적으로 많은 연구를 필요로 하고 있다[1-3].

특히 SF₆(sulphur Hexafluoride)기체는 1950년대 최초로 전력용 변압기의 기체 절연체료로 사용되었으며 1970년대에 기체 절연장치(GIS), 가스 차단기(GCB)등에 이용되어 상품화되기 시작하였으며 1980년대에 본격적으로 연구 개발되어 최근에는 화학적으로 안전하고 절연성과 소호성이 우수하여 기체 절연 전선로(GIL), 초 고전압 및 대용량 전력 차단기, 전력계통에 널리 이용되고 있다.

최근 SF₆ 기체를 포함한 혼합 기체에서 전자군 특성을 정량적으로 파악하기 위해서는 전자에너지 분포함수를 갖는 전자군과 각각의 하전 입자군과의 충돌현상으로 나타나는 전자이동속도, 확산계수, 전리, 부착계수 등 전자수송계수에 대해 이론적, 실험적 해석에 의한 규명이 필요로 된다.

전자의 전리, 부착, 실효전리계수 및 전자수송계수의 특성 연구는 혼합기체의 전기 절연내력의 절적인 향상과 절연용

기체의 개발 및 각종 고전압 기기의 이용 가능성 등의 응용 분야에서 장래의 적용 가능성에 대한 그의 물성적 특성(기초적인 전자 수송계수, 전자 충돌 단면적) 연구에 매우 중요 시된다. 전자 수송계수의 거동은 전자와 기체 원자, 분자의 전자 충돌 단면적에 대한 이론적, 실험적인 방법으로 결정된다. 여기서 이론적 방법으로는 MCS(Monte Carlo Simulation)와 BEq(Boltzmann Equation)를 이용하고, TOF(Time of Flight)법을 이용한 실험에 의해 전자도착 시간분포를 구한다.

2. 해석 방법

몬테칼로법은 2차 세계대전기간 동안에 원자탄 개발을 위한 중성자 수송에 관련된 문제를 해결하기 위한 목적으로 많은 과학자들에 의해 연구, 발전되어왔다. 다양한 응용분야에서의 몬테칼로법 중에서 기체중의 전자의 거동에 관한 몬테칼로 시뮬레이션(MCS)으로는 H. Itoh, M. Musha 및 R. W. L. Thomas, W. R. L. Thomas 에 의해서 최초의 연구가 시작되었다[4].

전계가 존재하는 공간의 방전 메카니즘에 있어서 전자는 전계에 의해서 높은 에너지를 갖게 되지만 전자에너지가 평형상태에 있지 않으므로 전자에너지분포를 추정하기는 매우 어렵다. 따라서 이러한 상태에서 전자 에너지 분포를 산출해 내는데 몬테칼로 시뮬레이션은 매우 유용하다.

MCS은 난수(Random Number)를 이용하여 충돌의 종류, 산란후의 방향 및 비행시간 등을 결정하면서 전자의 운동을 반복 추적한다. 또한 전자군의 성질을 조사하기 위한 몬테칼로 법은 전자계 내의 전자 운동 상태와 분자의 충돌 산란 확률을 고려하여 전자, 이온의 상태를 추적하는 것을 기본으로 하여 입자를 확률 현상의 난수로 모의하는 방법을 말한다. 사용하는 난수는 컴퓨터에서 발생하는 [0~1]사이의 의사난수(Pseudo random number)이다.

본 논문의 이론적인 해석은 몬테칼로법(MCS)과 볼츠만법(BEq)을 이용하여 전자에너지 분포함수와 전자수송계수(전

[†] Corresponding Author : Dept. of Electrical Engineering
Incheon National University, Korea

E-mail : sn7332@inu.ac.kr

접수일자 : 2015년 7월 20일

수정일자 : 2015년 8월 19일

최종완료 : 2015년 8월 21일

자균 파라미터)를 구하는 것으로 이것은 [0~1]사이 에 일정한 분포를 갖는 난수(Random number)를 이용하여 충돌의 종류, 산란후의 방향 및 비행시간 등을 결정하면서 전자의 운동을 반복 추적한다.

난수를 이용하여 충돌현상을 확률적으로 취급하고 사용한 난수를 계산기에 발생시켜 [0,1] 사이에 대응할 때 독립한 난수열을 다수회 시행하여 평균치를 계산기로 구하는 것이다. 난수를 변수 θ 와 $d\theta$ 의 미소 범위에서 발생하는 확률을 $f(\theta)d\theta$ 로 나타내면 다음과 같이 식(1)으로 나타낸다[5-8].

$$\int_0^{\theta_{\max}} f(\theta)d\theta = r \tag{1}$$

여기서 r은 0~1사이 에 균일하게 분포되어 있는 난수이다. 본 연구에서는 산술난수인 승적합동법으로 의사난수를 구하여 사용하고 승적합동법은 다음과 같은 난수발생법으로 나타낸다.

$$Y_{k+1} = ar_k + c \pmod{m} \tag{2}$$

식(1)에 의해서 순차적으로 $r_1, r_2, r_3, \dots, r_k$ 를 발생시켜가는 방법이다. 여기서 a, c, m 은 정의 정수이며 본 논문의 프로그램에서는 다음의 값을 이용하였다.

$$a : 1229, c : 351750, m : 1664501$$

이 경우에 $ar_k + c$ 를 m 으로 나누어서 남은 나머지를 의미한다. 또한 r_k 에 대해서는

$$S_k = \frac{r_k}{m} \tag{3}$$

으로 계산하면 S_k 는 구간 [0, 1] 사이의 일정한 분포의 난수가 된다. 이 방법으로 발생한 난수 r_k 는 $0 \leq r_k \leq m-1$ 를 찾아내어 m 개를 생성하고 계속 반복된다.

TOF에서는 전자의 위치와 시간을 지정하기 때문에 샘플수가 적으며 에너지분포를 구할 때에도 샘플수는 적게되어 통계적 변동이 많이 포함하는 결과를 나타낸다. TOF 샘플링법으로 방전공간의 전자수송계수를 구하기 위해서는 시간 t_k, t_{k+1} 에서 전자의 샘플수를 M_k, M_{k+1} 위치 영역을 $Z_i(t_k)$ 로하면 시간 t_k 에서의 전자군 중심의 평균위치 $\langle Z_i(t_k) \rangle$ 는 다음과 같 t_k 이 식(4)으로 나타낸다[6].

$$\langle Z(t_k) \rangle = \frac{1}{M_k} \sum_{j=1}^{M_k} Z_j(t_k) \tag{4}$$

전자군의 중심 이동속도 W는 다음과 같다.

$$W = \frac{\langle Z(t_{k+1}) \rangle - \langle Z(t_k) \rangle}{t_{k+1} - t_k} \tag{5}$$

한편 전자의 확산계수는 시간 t_k 일때 전자의 전계방향의 중심위치를 $Z_m(t_k)$ 라하면 종방향 확산계수 D_L 은

$$D_L = \frac{1}{2!M_k} \sum_{j=1}^{M_k} \{Z_j - Z_m(t_k)\}^2 \tag{6}$$

식(5)의 시간에 대한 기울기로 나타낸다.

그리고 횡방향 확산계수 D_T 는 전계에 직각방향으로 위치가 분산되어 다음과 같이 시간에 대한 기울기로 나타낸다.

$$D_T = \frac{1}{2} \frac{1}{2!M_k} \sum_{j=1}^{M_k} (r_j)^2 \tag{7}$$

여기서 r_j 는 Z_j 의 직각 방향의 성분이다.

평균에너지 ($\bar{\epsilon}$)는 i 번째의 에너지를 ϵ_i 라고 하면

$$\bar{\epsilon} = \frac{1}{M_k} \sum_{j=1}^{M_k} \epsilon_i \tag{8}$$

로 나타낸다.

그리고 전자사태의 공간성장과정이 정상상태 일 때 전자

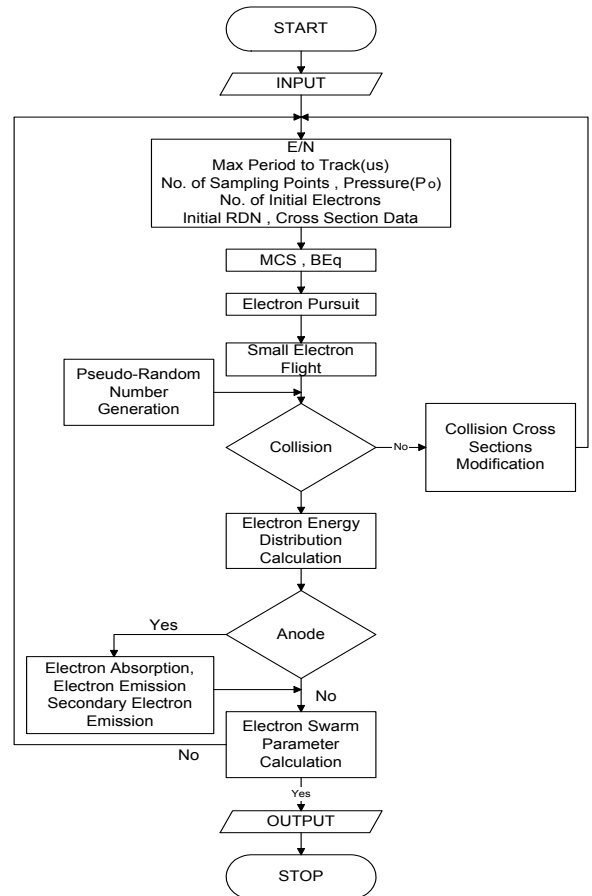


그림 2.1 전자 시뮬레이션 흐름도
Fig. 2.1 Flowchart of the simulation

군 파라미터를 이용하여 전리계수, 부착계수 및 실효전리계수는 2항 근사에 의한 볼츠만 방정식의 해석에서 아래 식 (9), (10)으로 나타낸다[5, 6].

$$\alpha = \frac{v_{is}}{\frac{\overline{W_s}}{2} + \left\{ \left(\frac{\overline{W_s}}{2} \right)^2 - (v_i - v_a) D_s \right\}^{\frac{1}{2}}} \quad (9)$$

$$\eta = \frac{v_{as}}{\frac{\overline{W_s}}{2} + \left\{ \left(\frac{\overline{W_s}}{2} \right)^2 - (v_i - v_a) D_s \right\}^{\frac{1}{2}}} \quad (10)$$

여기서 v_i 는 전리주파수, v_a 는 부착주파수이다. 전계가 존재하는 공간의 방전 메카니즘에 있어서 전자는 전계에 의해서 높은 에너지를 갖게 되지만 전자에너지가 평형상태에 있지 않으므로 전자에너지분포를 추정하기는 매우 어렵다. 문태칼로 시뮬레이션은 매우 유용하다. 전자군 시뮬레이션 결과는 FORTRAN77을 SPARC WORKSTATION을 이용하여 계산하였다.

그림 2.1은 본 연구에 사용된 시뮬레이션 흐름도를 나타내었다.

3. 전자충돌 단면적

3.1 SF₆의 전자 충돌 단면적

본 연구에 이용한 SF₆의 전자 충돌 단면적은 H. Itoh et al.의 Set을 사용하였으며, 그림 3.1에 나타내었다[9-11].

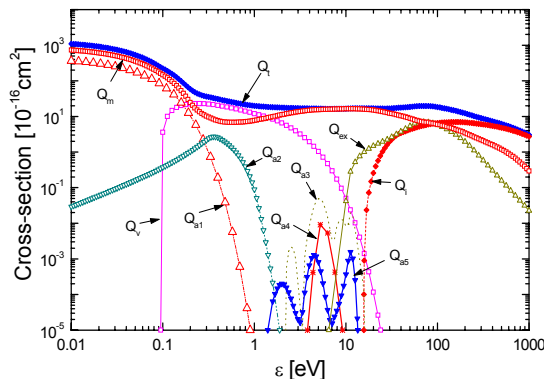


그림 3.1 SF₆기체의 전자 충돌 단면적
Fig. 3.1 Collision cross sections for electrons in SF₆

그림의 SF₆ 전자 충돌 단면적은 다른 원자, 분자에 비하여 매우 큰 전자 부착 단면적 (Q_{a1} , Q_{a2})이 낮은 에너지영역에 존재하고 또한 해리성 부착단면적 (Q_{a3} , Q_{a4} , Q_{a5})의 Threshold에너지 값은 각각 3.29 eV, 3.95 eV, 1.57 eV를 이용하였다. 그리고 탄성충돌에 의한 운동량 변환 단면적 (Q_m), 여기 단면적(Q_{ex}), 전리 단면적(Q_i), 진동 여기 단면적 (Q_v) 및 전충돌 단면적(Q_T) 등의 값을 이용하여 계산하였다.

3.2 Ar의 전자 충돌 단면적

Ar의 전자 충돌 단면적에 대한 운동량 변환 단면적(Q_m), 여기 단면적(Q_{ex}), 전리 단면적(Q_i)등을 그림 3.2에 나타내었다 [12-14].

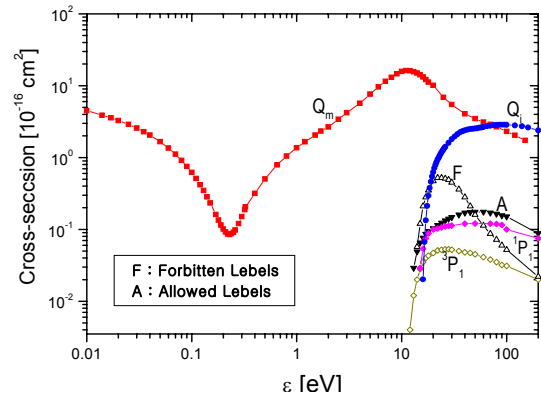


그림 3.2 Ar기체의 전자 충돌 단면적
Fig. 3.2 Collision cross sections for electrons in Ar

그림의 Ar 전자 충돌 단면적은 저 에너지 영역(0~0.23 eV)에서 Ramsauer Townsend minimum을 갖는 운동량 변환 단면적(Q_m)은 K. L. Bell, N. S. Scott의 계산값을 이용하였고 전자에너지 0.136~54.4 eV 영역의 범위에서는 W. C. Fon의 측정값을 이용하였으며, 여기 단면적(Q_{ex})은 허용대 준위의 여기 단면적(3P_2 , 3P_1 , 3P_0 , 1P_1)과 금지대 준위의 여기 단면적 (13.0~13.9 eV)으로 분류하여 Y. Nakamra, M. Kurachi, A. Chutjian 등의 측정값을 이용하고 전리 단면적은 Arati Dasgupta and A. K. Bhatia이 측정된 결과를 이용하였다.

4. 결과 및 고찰

4.1 SF₆ 기체에서 전자의 종·횡방향 확산계수

그림 4.1와 그림 4.2는 SF₆ 기체의 종방향 확산계수와 횡방향 확산계수를 E/N[Td]을 파라미터로 하여 MCS와 BEq 방법으로 구하고, A. V. Phelps and R. J. Van Brunt의 실험값[12]과 본 연구의 실험값을 비교하였으며, 그 결과 거의

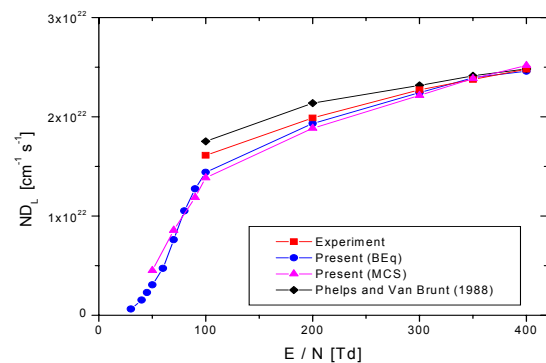


그림 4.1 SF₆ 기체에서 전자의 종방향 확산계수
Fig. 4.1 Longitudinal diffusion coefficients of SF₆

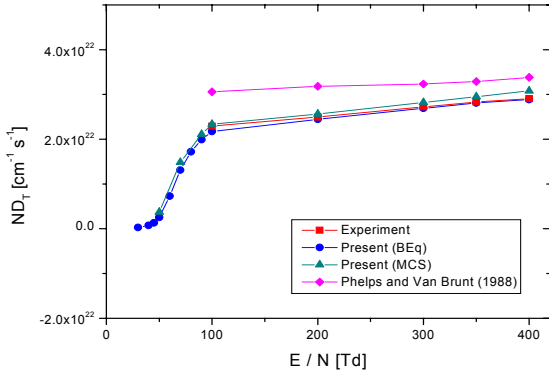


그림 4.2 SF₆ 기체에서 전자의 횡방향 확산계수
Fig. 4.2 Transverse diffusion coefficients of SF₆

일치한 값을 얻었다.

전자의 확산계수와 기체 분자수 밀도와와 ND_L , ND_T 를 E/N [Td]의 함수로 전리, 부착계수 및 이동속도의 영향으로 하전입자밀도의 공간적 구배와 전계가 공존하는 공간내에서 하전입자의 거시적 운동이 일어나지 않고 평형 상태의 균일한 밀도 분포를 나타낸 것이다.

그러나 낮은 E/N [Td] 영역에서는 하전입자 밀도의 구배가 급격히 변화 한 것은 분자의 여기 과정 영향으로 미소 거리를 진행하는 사이에 비평형 상태로 밀도 분포가 균일하지 않는 현상으로 생각된다.

4.2 Ar 기체에서 전자의 종 · 횡방향 확산계수

그림 4.3은 종방향 확산계수를 압력 $P_0=0.1$ [Torr], 온도 $T=300$ [K] 일때 E/N [Td]의 변화에 따라서 볼츠만 방정식의 2항 근사식 이론 값과 Y. Suzuki의 실험값[10]을 비교하여 나타낸 것이다.

그림에 나타난 바와 같이 $1 \leq E/N \leq 600$ [Td]범위에서는 탄성, 비탄성 충돌작용의 등방 산란을 고려한 볼츠만 해석과 실험값은 거의 일치하였고, Y. Suzuki의 실험값은 낮은 E/N [Td]에서 일치하였다[9].

이것은 전자와 기체 분자간에 Ar 미분 단면적에 의해 전방산란과 종방향 확산계수의 영향으로 전자의 비율이 크게 작용되고 있기 때문으로 생각된다.

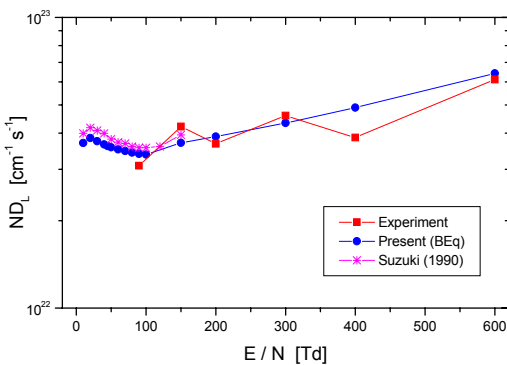


그림 4.3 Ar 기체에서 전자의 종방향 확산계수
Fig. 4.3 Longitudinal diffusion coefficients of Ar

그림 4.4는 Ar 기체의 횡방향 확산계수를 압력 $P_0=0.1$ [Torr], 온도 $T=300$ [K]일 때 E/N [Td]의 변화에 따라서 볼츠만 방정식의 2항 근사식 이론 값과 Suzuki의 실험값과 본 연구의 실험값을 비교하여 나타낸 것이다.

그림에 나타난 바와 같이 $1 \leq E/N \leq 400$ [Td] 범위에서는 탄성, 비탄성 충돌작용의 등방 산란을 고려한 볼츠만 해석과 실험값과 Y. Suzuki의 실험값[10]과 본 연구의 실험값의 비교 결과는 거의 일치하였다.

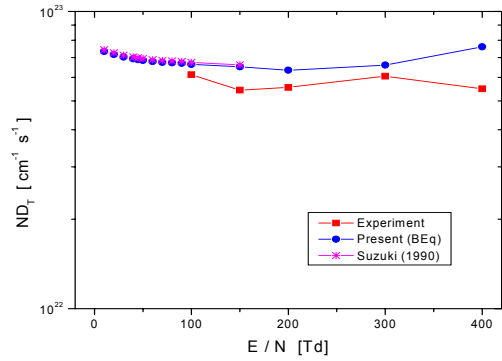


그림 4.4 Ar기체에서 전자의 횡방향 확산계수
Fig. 4.4 Transverse diffusion coefficients of Ar

4.3 SF₆-Ar 혼합기체에서 종 · 횡방향 확산계수

그림 4.5와 그림 4.6은 SF₆-Ar 혼합기체의 종방향 확산계수와 횡방향 확산계수를 E/N [Td]를 파라미터로 하여 MCS와 BEq법으로 혼합비에 따라 계산하였고, 전자도착 시간분포에 의해 실험적으로 구하여 그 결과를 나타낸 것이다. 방전 공간 내에서 하전입자 밀도 분포가 균일하지 않는 경우에는 밀도가 이동하여 확산 현상이 나타나는 것으로 이 현상은 하전입자가 전리 기체 공간에서 소실되어 가는 것으로 1차원의 경우 탄성과 비탄성 충돌에 의하여 입자의 운동량의 변화가 일어나는 것이다.

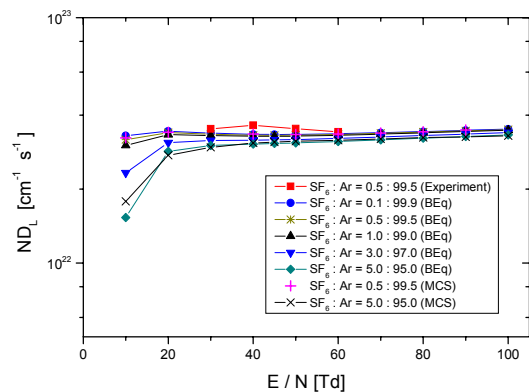


그림 4.5 SF₆-Ar 기체에서 전자의 종방향 확산계수
Fig. 4.5 Longitudinal diffusion coefficients of SF₆-Ar

이 때 하전입자 밀도의 구배와 전계가 동시에 존재하는 공간 내에서 하전입자의 거시적 운동이 일어나지 않는 평형 상태에서는 거의 균일한 밀도분포가 나타난 것으로 본다.

이것은 열평형 상태에 있는 하전입자 밀도의 공간 분포로

서 볼츠만 분포를 갖는다[13-15].

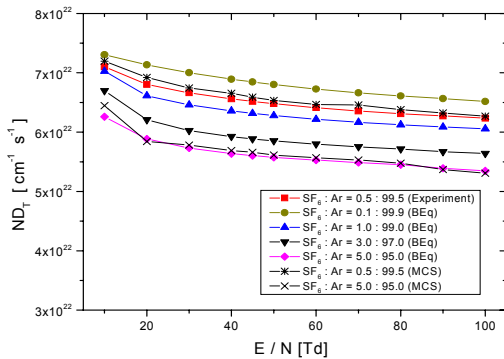


그림 4.6 SF₆-Ar 기체에서 전자의 횡방향 확산계수
 Fig. 4.6 Transverse diffusion coefficients of SF₆-Ar

5. 결 론

본 연구는 탄성 및 비탄성 충돌 단면적과 전리증식의 전자군을 형성하는 E/N[Td] 영역에서 혼합기체의 혼합비에 따른 전리, 부착, 실효전리계수 및 전자수송계수를 볼츠만 방정식과 몬테칼로 시뮬레이션을 이용한 이론 해석과 전자 도착 시간분포를 측정하는 실험장치에 의해 해석한 결과 다음과 같은 결론을 얻었다

SF₆, Ar 순수기체 및 SF₆-Ar 혼합기체에 대해 E/N=10~600[Td]범위 내에서 전자의 종·횡 방향 확산계수를 구하였다. 계산 결과, 측정범위에서 실험 값과 거의 일치함을 입증하였다.

전자의 종·횡 방향 확산계수는 평균 에너지가 평형 상태인 경우 Sample=14, L=2.6[cm]에서 2방향사의 볼츠만 법에 의한 등방성분(F₀)과 비등방성분(F₁)을 몬테칼로 시뮬레이션으로 계산한 값과 비교시 현저한 차이를 나타내었으며, 이것은 전자가 여기에 의해서 에너지를 잃어버린 값이 다른 영역에 비해 큰 것으로 생각된다. 그리고 전자군 연구에 이용한 전자 충돌 단면적의 타당성을 입증하였다.

향후 본 연구의 결과를 토대로 다양한 다른 기체에 대해서도 같은 과정을 통하여 전자의 수송 계수를 얻을 수 있을 것으로 확신한다. 이렇게 얻은 계수의 데이터를 바탕으로 새로운 고전압 전기재료 분야의 물성적 기초 자료 연구와 실제 기기의 설계에 적용, 기체 방전 모델을 확장한 정량적 해석도 가능할 것으로 생각한다. 특히 최근 주목되고 있는 펄스 코로나 방전을 이용한 CO_x, NO_x, SO_x 등의 오염 물질을 제거시키는 배기 가스 처리 문제에도 응용할 수 있다고 본다.

감사의 글

본 논문은 인천대학교 2015년도 자체연구비 지원에 의하여 연구되었습니다. 대학당국에 감사드립니다.

References

[1] Huxley L G H and Crompton R W “The Diffusion and Drift of Electrons in gases”(New York:Wiley) 1974
 [2] H. Itoh, Y. Miura, N. Ikuta, Y. Nakao and H. Tag

ashira, “Electrons warm development in SF₆ :I. Boltzmann equation analysis” Phys. D:Appl. Phys 21, pp.922-930, 1988.

[3] Electrical Engineers Technical report, “Gas discharge simulation techniques” No. 140, 1974.
 [4] R. W. L. Thomas, and W. R. L. Thomas, “Monte Carlo Simulation of electrical discharge in gases”, J. Phys. B. Vol.2, pp.562-570, 1969.
 [5] Rubinstein, L. “Simulation and Monte Carlo Method”, John Wiley, New York. 1981
 [6] S. Trajmar, A. Chutjian, electron impact excitation of SF₆” J. Phys. B, Vol. 10, pp.2943~2949, 1977.
 [7] S. C. Ha, B. H. Jeon, S. G. Baek, “Monte Carlo Study on electron transport coefficients of Ar gas using a method” , KIEEME, Vol. 8, No. 6, pp. 685 ~ 692, 1995.
 [8] Y. Nakamura. “Transport Coefficients of Electrons and Negative Ions SF₆.” J. Phys. D, Vol. pp. 1~36, 1981.
 [9] Y. Nakamura and M. Kurachi, “Electron Transport Parameters in Argon and its momentum transfer cross section” J. Phys. 21, pp.718~723, 1988.
 [10] Y. Suzuki, T. Taniguchi and H. Tagashira “Monentum transfer cross section of argon deduced from electron drift velocity data”, J. Phys. D: Appl. Phys. 23, pp.842~850, 1990.
 [11] J. S. Chang and R. M. Hobson, “atomic and molecular process of ionization” Tokyo Electrical University Press, 1982.
 [12] A. V. Phelps and R. J. Van Brunt “Electron trasport ionization attachment and dissociation coefficients in SF₆ and its mixtures”, J. Appl. Phys. 64 pp.4269~4277, 1988.
 [13] S. N. Kim, “Ionization and Attachment Coefficients in CF₄, CH₄, Ar Mixtures Gas” 61P-1-4, KIEE, pp13~18, 2012
 [14] S. N. Kim, “Electron Energy Distribution function in CH₄ gas by MCS-BEq” 62P-1-4, KIEE, pp. 18~22, 2013
 [15] S. N. Kim, “Ionization and diffusion Coefficients in CH₄ gas by Simulation ” 63P-4-4, KIEE, pp. 317~321, 2014

저 자 소 개



김 상 남 (金 相 南)

1951년 3월 21일생. 1978년 숭실대학교 전기공학과 졸업. 1980년 숭실대학교 대학원 졸업(석사), 2001년 동국대학교 대학원 졸업(공학), 1978년~2009년 시립인천전문대학 전기과 교수, 2010년~국립인천대학교 전기공학과 교수

E-mail : sn7332@inu.ac.kr

sn7332@hanmail.net