

양방향 펄스전원을 이용한 NO 가스의 방전처리

주흥진, 박정호, 심재학, 고광철, 강형부
 한양대학교 전기공학과, * 순천제일대학 기계전기제어과, ** 한양대학교 전기전자공학부

Discharge Processes of NO Gas Using Bidirectional Pulsed Voltage

Heung-Jin Ju, Jeong-Ho Park, Jae-Hak Shim, Kwang-Cheol Ko, Hyung-Boo Kang
 Hanyang Univ., * Sunchon First College

Abstract - In removing the flue-gas using electrical discharge method, it is important to dissociate or ionize the atoms and molecules by the collisions with energetic electrons and it produces the radicals that are used to decompose the pollutants. For that purpose, a bidirectional pulsed voltage is used to produce lots of energetic electrons efficiently and increase the power efficiency. The simulation is performed with changing the pulsewidth under the fixed applied voltage. The particle-mesh model coupling the NGP(nearest-grid-point) to FEM(finite element method) is used to simulate the behavior of electrons and the spatio-temporal variation of the electric field for the streamer in discharge tube.

하는 이러한 라디칼을 생성할 수 있는 전자의 거동을 해석하였다.

3. 수치해석 방법

그림 1은 본 시뮬레이션에 사용된 반응기의 요소 분할된 구조이다. 중심을 와이어 전극으로 하고, 2차원 축대칭 모델을 해석하였다. 반응기의 직경은 52.7[mm], 중심 와이어의 직경은 1[mm]이다. 1기압 N₂ 가스에서 와이어 60[ns], 80[ns], 100[ns]의 양방향 펄스 폭(정·부 방향이 각각 30[ns], 40[ns], 50[ns]), 48kV의 펄스 전압을 인가하였다. 유한요소법을 이용하여 반응기 내에서의 전계를 계산하였고, 몬테칼로법을 사용하여 입자의 거동을 추적하였다.

1. 서 론

자동차, 공장, 화력발전소 등의 연료 연소과정에서 발생하는 질소산화물(NOx), 황산화물(SOx)은 인체에 유해한 배기가스의 주요 성분으로 이를 제거하기 위한 다방면의 연구가 진행중이다. 기존에 사용된 화학적 방법은 다량의 촉매를 사용해야 하며, 2차 오염물질을 배출시키는 단점을 가지므로 현재는 펄스 코로나, 유전체 장벽 코로나 등의 방전법이 활발히 연구중이다. 특히 방전법을 사용하면 기체가 직접 에너지를 받을 수 있으므로, 전력효율을 높일 수 있다. 그러나 펄스 폭이 긴 방전을 이용하면, 전력은 주로 분자를 가열하는데 이용되므로, 효율을 높이기 위해 기체의 전리와 여기에 관여하는 고에너지 전자를 다수 발생시킬 수 있는 짧은 펄스 폭을 갖는 펄스 방전을 발생시키는 것이 좋다.[1][2][3] 다량의 전자를 생성시키기 위해 양방향 펄스 전원을 인가하면 와이어 전극에 정전압이 인가시 중심 전극부근에서 생성된 다량의 전자가, 부전압이 인가시 방전관 전체로 방출되므로 대용량의 기체를 효율적으로 처리할 수 있다.

본 논문에서는 동축형 방전용기의 와이어 전극에 양방향 펄스 전압을 인가하여 방전용기 내에서 전자의 거동을 확인하였다.

2. 이 론

짧게 유지되는 펄스 전압은 이온, 분자를 가열하는 대신, 라디칼을 발생시키는 고에너지 전자를 생성하고, 이때 발생된 라디칼은 오염물질을 분해한다. 보통 전자는 6.5eV의 에너지로 NO 가스를 직접 분해할 수 있지만 배기가스 내에서 NO는 수백 ppm 정도로 그 양이 적고, 대부분이 N₂, O₂, H₂O 등으로 구성되어 있으므로 전자는 보통 이들 공기 입자들과 많은 충돌을 하게 된다. 전리, 해리, 여기와 같은 충돌을 통해 전자는 O, N, OH와 같은 라디칼을 생성하게 되고, 이렇게 생성된 라디칼들이 NOx/SOx와의 반응을 통해 배기가스를 분해하게 된다.[2]

본 연구에서는 유해가스를 처리하는데 중요한 역할을

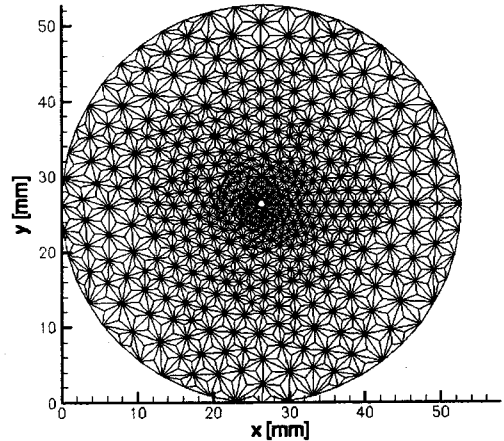


그림 1. 전계 계산에 사용된 해석영역의 요소

3.1 요한요소의 이산화

임의의 요소 e내의 포텐셜 V_e 를 구하면, 여러 요소에서 포텐셜 분포는 서로 연관이 있으므로 포텐셜은 요소 경계에서 연속이다. 따라서 전체 영역에 대한 근사해는

$$V(x, y) = \sum_{e=1}^N V_e(x, y)$$

로, 여기서, N은 삼각요소의 갯수이다. 요소 내에서의 포텐셜 V에 대한 일반적인 형태는 다항식으로 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$V_e(x, y) = a + bx + cy$$

일반적으로 삼각형 요소를 사용하는 경우 각 격자점에 해당하는 포텐셜을 $V_{e1}(x_1, y_1)$, $V_{e2}(x_2, y_2)$, $V_{e3}(x_3, y_3)$ 라 하면 이때 요소내의 전압 V_e 는 다음과 같이 구할 수

있다.

$$V_e = [1 \ x \ y] \frac{1}{2A} \begin{bmatrix} x_2 y_3 - x_3 y_2 & x_3 y_1 - x_1 y_3 & x_1 y_2 - x_2 y_1 \\ y_2 - y_3 & y_3 - y_1 & y_1 - y_2 \\ x_3 - x_2 & x_1 - x_3 & x_2 - x_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_{e1} \\ V_{e2} \\ V_{e3} \end{bmatrix}$$

또는, $V_e = \sum_{i=0}^3 N_i(x, y) V_{ei}$ 가 된다. 단, A는 삼각형의 면적을 나타낸다.[4]

한편, 전체의 세기 E의 x, y 성분은 다음 공식에 의해 구할 수 있다.

$$E_x^{(e)} = -\frac{1}{2A^{(e)}} (c_{e1} V_{e1} + c_{e2} V_{e2} + c_{e3} V_{e3})$$

$$E_y^{(e)} = -\frac{1}{2A^{(e)}} (d_{e1} V_{e1} + d_{e2} V_{e2} + d_{e3} V_{e3})$$

여기에서 $c_{ei} = y_{ej} - y_{ek}$, $d_{ei} = x_{ek} - x_{ej}$ (i, j, k는 순환수)이고, (e)는 요소번호를 나타낸다.

3.2 몬테칼로법

전자의 거동은 다음과 같은 방법으로 결정되어진다.[5][6]

- (1) 전자의 궤도 운동의 계산
- (2) 시간의 결정
- (3) 충돌과 충돌 종류의 판정
- (4) 충돌 후의 전자 산란방향의 결정
- (5) 충돌 종류와 산란방향에 의해 충돌후의 전자에너지 혹은 속력 결정
- (6) 전리 발생시 생성 전자와의 에너지의 분배, 운동 방향의 결정 등

여기에서 (3)-(6)의 과정에서 [0, 1] 사이의 난수 (ξ)를 사용하여 충돌현상을 확률적으로 취급한다.

(a) 전자 운동의 계산

전자는 전기장에 의해 가속되어 운동을 하게 된다. 이때 이동한 위치는 다음과 같다.

$$x = x_0 + v_x \Delta t + \frac{q}{m} E_x (\Delta t)^2$$

$$y = y_0 + v_y \Delta t + \frac{q}{m} E_y (\Delta t)^2$$

여기서, Δt 는 time step으로 본 논문에서는 10^{-13} sec이다.

(b) 충돌과 충돌 종류의 판정

전자가 Δt 동안 충돌할 확률 P는

$$P = 1 - \exp(-Nq_i v \Delta t)$$

로, 여기서 N은 중성기체의 밀도, q_i 는 전충돌단면적, v는 전자의 속도이다. 난수를 발생시켜, 그 난수가 확률 P보다 작으면, 충돌이 발생한 것으로 판정한다.

충돌단면적은 에너지의 함수로 전충돌단면적은 탄성 (q_{el}), 여기 (q_{ex}), 전리충돌단면적 (q_{ion})의 합이다. 여기에서 충돌 종류의 판정은 아래 식과 같이 판정하게 된다.

$$\begin{aligned} \xi \leq q_{el}(\epsilon') / q_T(\epsilon') & \dots \dots \dots \text{탄성충돌} \\ q_{el}(\epsilon') / q_T(\epsilon') < \xi < \{q_{el}(\epsilon') + q_{ex}(\epsilon')\} / q_T(\epsilon') & \dots \dots \dots \text{여기충돌} \\ \xi > \{q_{el}(\epsilon') + q_{ex}(\epsilon')\} / q_T(\epsilon') & \dots \dots \dots \text{전리충돌} \end{aligned}$$

(c) 충돌후 전자산란 방향 결정

입사방향 (θ', ϕ') 및 여기에 대응하는 산란방향 (ω, χ)로부터, 전자의 새로운 운동방향 (θ, ϕ)는 산란방향이 입사방향에 의존하지 않는 점을 이용해서

$$\cos \theta = 1 - \xi_1$$

$$\varphi = 2\pi \xi_2$$

로써 계산한다 (ξ_1, ξ_2 는 난수). 단지 편향각 ω 는

$$\cos \omega = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi')$$

로 해서 구해서 충돌후의 전자 속도의 결정에 사용한다.

(d) 산란된 전자의 에너지 결정

충돌후의 전자가 갖는 에너지는, 입사 에너지 ϵ' 와 충돌에 의한 손실에너지 $\Delta\epsilon$ 와의 차로 결정된다.

$$\epsilon = \epsilon' - \Delta\epsilon$$

탄성충돌에 의한 에너지 손실은 다음과 같이 된다.

$$\Delta\epsilon = \frac{2m}{M} (1 - \cos \omega) \epsilon'$$

여기서, m은 전자의 질량, M은 원자의 질량을 나타낸다. 비탄성충돌에서의 에너지 손실은 상대분자의 내부상태를 변화시키기 위해 필요한 에너지 손실을 나타낸다. 여기 충돌에 있어서는 근접한 여기준위에 대응하는 통합된 여기단면적을 이용하고 전리충돌에 있어서는 전리에 의해 생성된 전자와 산란된 전자에 대한 에너지는 난수를 이용해 $\xi : (1 - \xi)$ 로 분배한다.

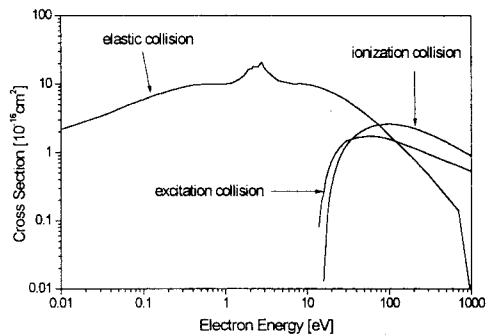


그림 2. N₂ 가스의 충돌단면적

4. 수치해석 결과

본 연구에서는 양방향 펄스 폭을 각각 60[ns], 80[ns], 100[ns]으로 하였을 때 라디칼을 생성하는 전자의 분포를 나타내었다. 그림 3은 60[ns]의 양방향펄스 전압을 인가했을 때 시간의 경과에 따른 반응기 내에서의 전자의 분포를 나타낸 것이다. 0[ns]-30[ns]까지는 와이어 전극에 정전압을 인가하고, 외부 원통 전극은 접지시켰다. 30[ns] 이후에는 와이어 전극에 (-) 전압을 인가하여 그림으로 나타내었다. 전자의 분포는 펄스 폭과 상관없이 같은 분포를 보인다. 와이어에 정전압이 인가된 경우, 외부 원통전극에서 전기장에 의해 가속된 전자는 30[ns]까지 와이어 전극에 도달하여 그 주위를 배회하면서 원자와 전리충돌하여 점차 그 수가 증가된다. 극성이 바뀌는 30[ns] 이후부터는 와이어 전극 근처에서 그 수가 급격히 증가하게 되는데 이는 와이어 전극 근처에서의 고전계의 영향 때문이다. 그 후 전자는 약간의 전리충돌을 일으키면서 외부 원통 전극에 흡수된다.

그림 4는 각각의 펄스 폭에서 시간에 따른 누적 전리충돌수를 나타낸 것이다. 극성이 바뀌는 시간까지는 전리충돌수가 양극에 도달함에 따라 천천히 증가하게 되나, 극성이 바뀌면서 고전계에 의해 그 수가 급격히 증가하기 시작한다. 펄스 폭이 작은 경우에는 전자가 원자(분자)와 충돌할 수 있는 상대적으로 시간이 짧으므로 생성된 전자의 수가 작다.

그림 5는 각각의 펄스 폭에서 극성이 바뀌는 시간부터 30[ns], 40[ns], 50[ns] 시간대 따른 전자의 평균에너지를 나타낸 것이다. 극성이 바뀌는 시간 전까지는 불규칙

적인 분포를 보이나, 극성이 바뀐 후부터는 와이어 전극에서 멀어질수록 평균에너지가 점차 작아지는 경향을 보인다.

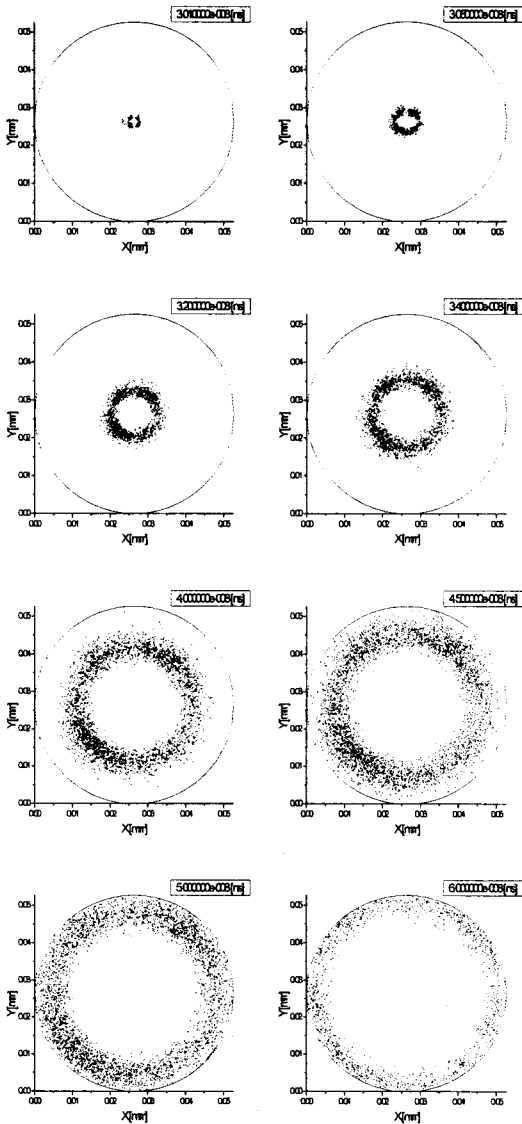


그림 3. 60[ns]의 양방향 펄스전압 인가시의 시간에 따른 전자의 분포

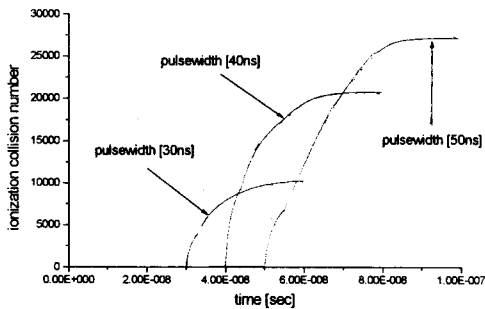


그림 4. 시간에 따른 누적 전리충돌수 분포

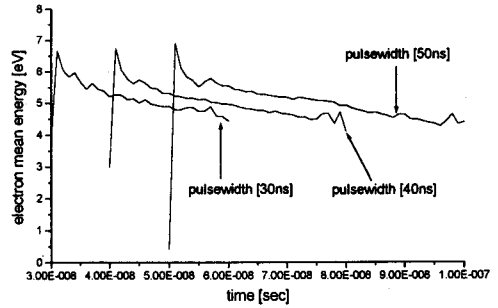


그림 5. 시간에 따른 전자의 평균에너지 분포

5. 결 론

유한요소법과 몬테칼로법을 결합하여 반응기 내에서의 전자의 거동을 해석하였다. 양방향 펄스전압을 인가함으로써 정전압 인가시 와이어 전극 근처의 전자가 부전압 인가시 급격히 증가하므로 효율이 높게 기체를 처리할 수 있음을 확인하였고, 더 짧은 펄스 폭에서 더 큰 제거 효율을 얻을 수 있으나, 라디칼을 발생시키는 전자의 수는 상대적으로 감소하게 된다.

(참 고 문 헌)

- [1] B.M.Penetrante, "Non-Thermal Plasma Technique Pollution Control", *NATO ASI Series*, 1994
- [2] 김용호, 홍상희, "교류 유전체장벽 코로나 방전을 이용한 NOx/SOx 분해실험" *Ungyong Mulli* vol.11, pp.393, 199
- [3] Takao Namihira, "Improvement of NOx Re Efficiency Using Short-Width Pulsed Power", *IEEE Plasma Sci.*, vol.28, pp.434, 2000
- [4] N.O.Sadiku, "Numerical Techniques in Electroma *CRC Press*, 1992
- [5] 電氣學會 技術報告, "기체방전 시뮬레이션 技法" 第 140号, 1974
- [6] C.K.Birdsall, "Particle-in-Cell Charged-Particle S ons, Plus Monte Carlo Collisions With Neutral A PIC-MCC", *IEEE Tran. Plasma Sci.*, vol.19, pp.65, 19