

# MCS-BEq 시뮬레이션에 의한 SF<sub>6</sub>-Ar 에너지 분포함수

(Energy Distribution Function in SF<sub>6</sub>-Ar Mixtures Gas used by Simulation)

김상남

(Sang-Nam Kim')

시립인천전문대학

## Abstract

Energy distribution function for electrons in SF<sub>6</sub>-Ar mixtures gas used by Simulation has been analysed over the E/N range 30~300[Td] by a two term Boltzmann equation and by 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[%] SF<sub>6</sub>-Ar mixtures were measured by time-of-flight (TOF) method.

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.

## 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 증대한 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][2][3].

이것은 전자 에너지 분포 함수를 갖는 전자군과 하전입자 군과의 충돌 현상으로 나타나는 전리 계수, 부착 계수 및 실효 계수 전자 이동 속도, 종·횡방향의 특성 에너지, 등의 전자 수송 특성의 실험적, 이론적 계산에 의하여 정량적으로 산출한다.

## 2. 해석 방법

몬테칼로법은 2차 대전기간 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[3].

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 산출해내는데 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 상태량을 추적하는 것을 기본으로 하여 입자를 확률 현상의 난수로 모의하는 방법을 말한다. 사용하는 난수는 컴퓨터에서 발생하는 [0~1]사이의 의사난수(Pseudo random number)이다.

전자군 시뮬레이션 결과는 FORTRAN77을 SPARC WORKSTATION을 이용하여 계산하였으며, 표 1. 볼츠만 시뮬레이션 결과의 예를 나타내었다.

표 1. 볼츠만 시뮬레이션 결과의 예  
Table 1. The results of Boltzmann equation simulation

```

***** Boltzmann Equation Analysis ( TSSMXFOR ) *****
cf4dat / ardat Mixture
Mix Ratio cf4dat : ardat = 5.000 : 95.000
E/N = 80.000 (Td) Temperature = 300.0 (K)
No. of Cross Section Included cf4dat : 8 ardat : 7
Maximum Energy for Distribution Function = 34.000 (eV)
Energy Separation = 0.11133E-01 (eV)
No. of Points for Distribution Function = 3000
Print Step = 50
Energy vs. Distribution Function
Energy(eV) f0 f1 f2 f3 fs f001
0.000 0.5998E-01 0.0000E+00 0.0000E+00 0.0000E+00 0.6059E-01 0.0000E+00
0.057 0.5364E-01 -1.138E-04 0.4611E-09 0.2473E-11 0.5998E-01 -5.237E-08
1.133 0.5223E-01 -2.218E-04 0.2538E-08 0.2714E-11 0.5998E-01 -4.366E-08
1.700 0.5143E-01 -4.033E-04 0.4836E-08 0.3510E-11 0.5942E-01 -2.232E-08
2.267 0.5031E-01 -4.033E-04 0.7532E-08 0.4874E-11 0.5714E-01 -8.440E-09
2.833 0.5488E-01 -4.731E-04 0.1030E-07 0.6830E-11 0.5553E-01 0.1513E-08
3.400 0.5314E-01 -5.393E-04 0.1303E-07 0.9353E-11 0.5393E-01 0.4223E-08
3.967 0.5116E-01 -5.836E-04 0.1593E-07 0.1217E-10 0.5158E-01 0.6963E-08
4.533 0.4893E-01 -6.236E-04 0.1894E-07 0.1518E-10 0.4923E-01 0.9863E-08
5.100 0.4644E-01 -6.520E-04 0.2164E-07 0.1834E-10 0.4673E-01 0.1270E-07
28.900 0.6178E-08 -5.343E-10 0.2179E-12 -5.446E-15 0.5562E-08 0.5412E-14
29.467 0.3465E-08 -3.067E-10 0.1281E-12 -3.293E-15 0.3110E-08 0.2979E-14
30.033 0.1938E-08 -1.753E-10 0.7499E-13 -1.994E-15 0.1734E-08 0.1629E-14
30.600 0.1082E-08 -9.897E-11 0.4578E-13 -1.190E-15 0.9654E-09 0.8882E-15
31.167 0.6035E-09 -5.694E-11 0.2551E-13 -7.117E-16 0.5370E-09 0.4833E-15
31.733 0.3376E-09 -3.049E-11 0.1489E-13 -4.255E-16 0.2966E-09 0.2636E-15
32.300 0.1912E-09 -1.874E-11 0.8752E-14 -2.561E-16 0.1692E-09 0.1451E-15
32.867 0.1126E-09 -1.120E-11 0.5314E-14 -1.584E-16 0.9943E-10 0.8272E-16
33.433 0.7399E-10 -7.402E-12 0.3540E-14 -1.065E-16 0.6527E-10 0.5275E-16
34.000 0.6142E-10 -6.124E-12 0.2919E-14 -8.755E-17 0.5421E-10 0.4318E-16

```

### 3. 전자충돌 단면적

#### 3.1 SF<sub>6</sub>의 전자 충돌 단면적

본 연구에 이용한 SF<sub>6</sub>의 전자 충돌 단면적은 H. Itoh et al.의 Set을 사용하였으며 그림 3.1에 나타내었다[6]~[9].

이 SF<sub>6</sub>의 전자 충돌 단면적은 다른 원자, 분자에 비하여 매우 큰 전자 부착단면적 ( $Q_{a1}$ ,  $Q_{a2}$ )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[eV]를 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.

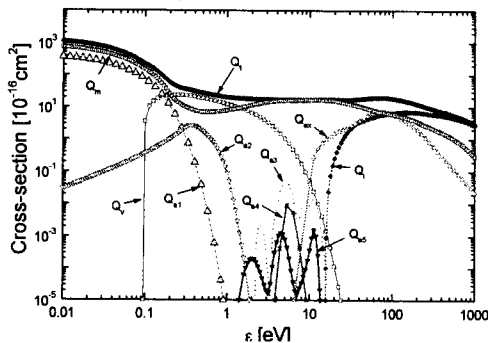


그림 3.1 SF<sub>6</sub>기체의 전자 충돌 단면적  
Fig. 3.1 Collision cross sections of electrons in SF<sub>6</sub> gas

### 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.

이 Ar의 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 이용하였다.

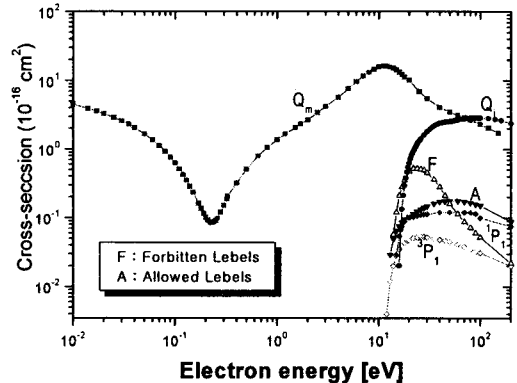


그림 3.2 Ar기체의 전자 충돌단면적  
Fig. 3.2 Collision cross sections of electrons in Ar gas

## 4. 결과 및 고찰

### 4.1 SF<sub>6</sub>기체에서의 에너지 분포함수

전계를 인가한 방전 공간에서 약전리 기체의 이동되는 전자군의 에너지 분포는 어떤 조건에서 전자의 각 에너지에 대한 확률 밀도와 전자와 분자 사이의 각종 충돌 단면적과의 방전현상으로 나타나는 전자수송 특성에 관련된 물리량이다.

하전입자는 여러 종류의 에너지 성분을 갖는 기체 분자가 열평형 상태 즉 Maxwell Boltzmann 에너지 분포를 나타낸다.

그림 4.1과 그림 4.2는 SF<sub>6</sub>기체의 E/N=500[Td]와 800 [Td]를 P<sub>0</sub>=1.0[Torr], 샘플 15, L=2.8[cm], ε=11.3[eV] 및 P<sub>0</sub>=1.0 [Torr], 샘플 15, L=3.0[cm], ε=14.5[eV]인 조건에서 MCS, BEq법으로 전자를 추적하여 나타낸 것이다. 그림으로부터 알 수 있는 바와 같이 전자 에너지 분포가 평형 및 비평형 영역으로 변화하였다.

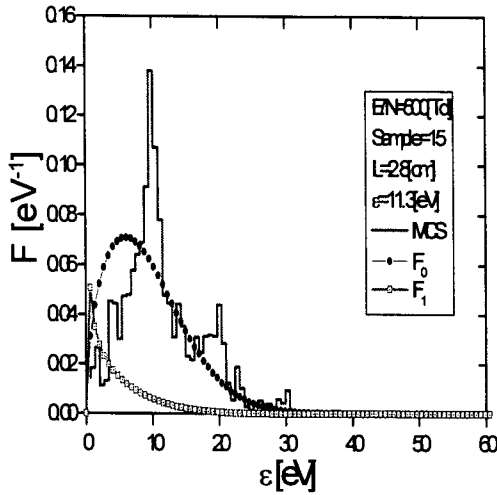


그림 4.1 SF<sub>6</sub>기체에서 전자에너지 분포함수(1)  
Fig. 4.1 Electron energy distribution function in SF<sub>6</sub> (1)

에서 일치하는 경향이 나타났다.

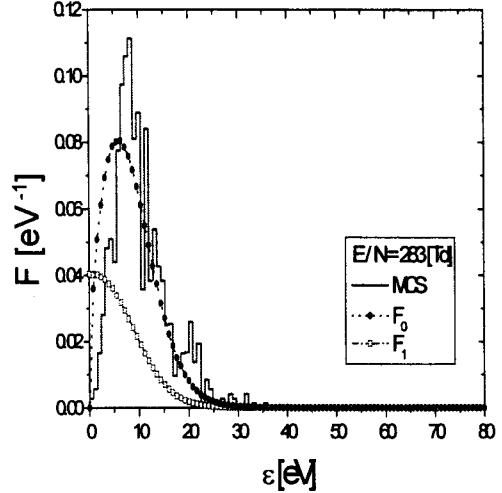


그림 4.3 Ar 기체에서 전자에너지 분포함수(1)  
Fig. 4.3 Energy distribution functions for electrons in Ar (1)

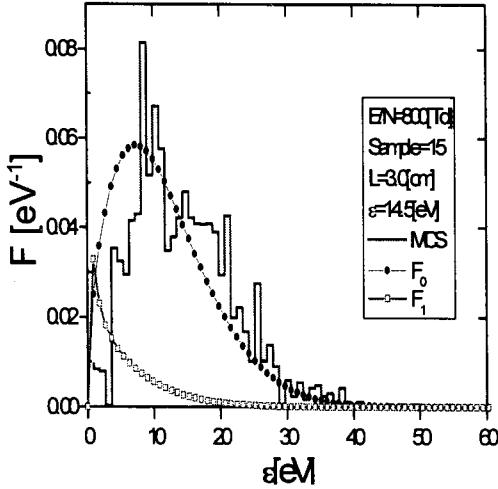


그림 4.2 SF<sub>6</sub>기체에서 전자에너지 분포함수(2)  
Fig. 4.2 Electron energy distribution function in SF<sub>6</sub> (2)

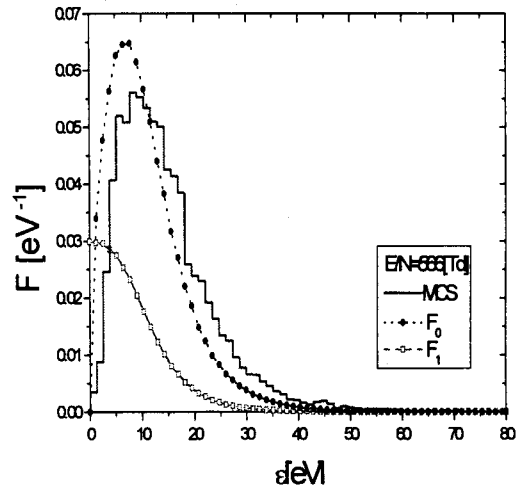


그림 4.4 Ar 기체에서 전자에너지 분포함수(2)  
Fig. 4.4 Energy distribution functions for electrons in Ar (2)

## 4.2 Ar기체의 에너지 분포함수

그림 4.3과 그림 4.4는 E/N = 283 [Td]와 E/N = 566 [Td] 일 때 P<sub>0</sub> = 0.1 [Torr], 샘플 12, L = 0.6 [cm] 및 평균 에너지 ε = 10.3 [eV]와 14.5 [eV]에서 MCS, BEq법으로 전자를 추적하여 나타내었다.

그림으로부터 알 수 있는 바와 같이 전자의 여기 충돌로 인하여 초기 에너지에서 비평형 영역이 나타났고 E/N = 283 [Td]에서는 6.3 [eV] 값에서 최대값을 나타내다가 그 이상에서는 감소하였고, 36 [eV] 값에서 일치하는 경향이 나타났고, E/N = 566 [Td]에서는 8.5 [eV] 값에서 최대값을 나타내다가 그 이상에서는 감소하였고, 50 [eV] 값

## 4.3 SF<sub>6</sub>-Ar 혼합기체의 에너지 분포함수

전자의 에너지 분포 함수는 외력이 작용하면 평형 상태에서 벗어나고 이때 분포 함수의 형태가 변한다. 분포 함수에 대한 전기력의 영향은 입자의 종류에 의하여 차이가 나며 전장 중에서 하전 입자는 가속되어 에너지로 변화하고 자장에서는 운동의 궤도가 변화한다. 따라서 전자 에너지 분포의 본질적인 영향은 전장 중에서 얻은 평균 에너지와 충돌로 잃은 에너지의 값으로 평가된다

그림 4.5는 0.5 [%] SF<sub>6</sub>+Ar 혼합기체의 E/N = 200 [Td] (P<sub>0</sub> = 1.0 [Torr], 샘플 = 14, L = 2.6 [cm] 및 ε = 7.3 [eV])와 0.2 [%] SF<sub>6</sub>-Ar

혼합기체의  $E/N = 200$  [Td] ( $P_0 = 1.0$  [Torr], 샘플 = 17,  $L = 2$  [cm], 평균 에너지  $\epsilon = 7.6$  [eV])에서 BEq법에 의한 전자 에너지 분포함수를 등방 성분( $F_0$ )과 비등방 성분( $F_1$ )으로 나타내고 MCS의 결과와 비교한 것이다.

이와 같은 현상은 Ar기체가 가지고 있는 운동량 변환단면적의 Ramsauer Townsend Minimum 영역과 부착 작용으로 잃어버린 에너지, 평균 에너지의 영향으로 생각된다. 따라서 에너지 분포함수를 이용하면 중성 입자와 하전입자의 밀도와와의 관계와, 전자 충돌 단면적으로부터 나타나는 잃은 에너지 및 전리 반응 과정을 분석할 수 있다.

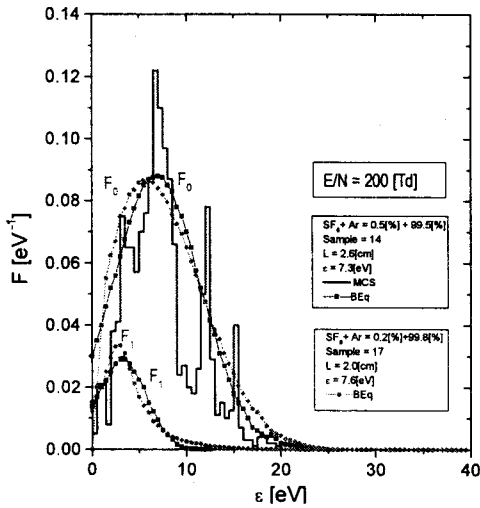


그림 4.5 SF<sub>6</sub>-Ar 혼합기체에서 전자에너지 분포함수  
Fig. 4.5 Energy distribution function for electrons in SF<sub>6</sub>-Ar

## 5. 결론

본 연구는 탄성 및 비탄성 충돌 단면적과 전리 증식의 전자군을 형성하는 비교적 낮은  $E/N$  [Td] 영역에서 혼합기체의 혼합비에 따른 전자 에너지 분포함수를 볼츠만 방정식을 이용한 이론 해석과 몬테칼로 시뮬레이션에 의해 해석한 결과 다음과 같은 결론을 얻었다

기본적인 이론 해석은 BEq법, MCS에 의하여 전리계수( $\alpha$ ), 전자 부착계수( $\eta$ ), 실효전리계수( $\alpha - \eta$ ), 등으로부터 전자 에너지 분포 함수는 평균 에너지가 평형 상태인 경우 Sample = 14,  $L = 2.6$  [cm]에서 2항근사의 볼츠만 법에 의한 등방성분( $F_0$ )과 비등방성분( $F_1$ )을 몬테칼로 시뮬레이션으로 계산한 값과 비교시 현저한 차이를 나타내었으며, 이것은 전자가 여기에 의해서 에너지를 잃어

버린 값이 다른 영역에 비해 큰 것으로 생각된다. 그리고 전자군 연구에 이용한 전자 충돌 단면적의 타당성을 확인하였다.

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 전기재료의 물성적 기초 자료에 활용과 실제 기기의 설계에 적용, 기체 방전 모델을 확장한 정량적 해석도 가능할 것으로 생각한다, 특히 최근 주목되고 있는 펄스 코로나 방전을 이용한 오염 물질을 제거시키는 배기가스 처리 문제에도 응용할 수 있다고 본다.

## 참 고 문 헌

- [1] H. Itoh, Y. Miura, N. Ikuta, Y. Nakao and H. Tagashira, "Electron swarm development in SF<sub>6</sub> : I. Boltzmann equation analysis" Phys. D: Appl. Phys 21, pp.922-930, 1988.
- [2] 전기학회 기술보고, "기체방전시뮬레이션기법" 제140호, 1974.
- [3] 谷口敏幸 *et al.*, "ボルツマン方程式による運動量變換斷面積の推定に關して." 放電研究會資料, ED-86-116, pp.39~49, 1986.
- [4] S. Trajmar, A. Chutjian, "electron impact excitation of SF<sub>6</sub>" J. Phys. B, Vol.10, pp. 2943 ~2949, 1977.
- [5] 하성철, 전병훈, 백승권, "몬테 칼로법을 이용한 Ar기체의 전자수송계수에 관한 연구", 한국전기전 자재료학회지, Vol. 8, No. 6, pp. 685~692, 1995.
- [6] 하성철, 서상현, "SF<sub>6</sub>가스의 전자수송특성에 관한 몬테칼로 시뮬레이션", 한국전기전자재료학회지, Vol. 9, No. 7, pp.660-667, 1996.
- [7] 김상남 "SF<sub>6</sub>-Ar 혼합기체에서의 전리 및 부착계수에 관한 연구" 공학박사 학위논문, 동국대학교, 2000
- [8] 김상남, 하성철, "SF<sub>6</sub>가스의 전자에너지 분포함수에 관한 연구", 한국조명·전기설비학회지, Vol.23-2-14, pp.227-233, 1999.
- [9] 김상남 "SF<sub>6</sub>-Ar혼합기체의 MCS-BEq에 의한 전자 분포함수" 대한전기학회 논문집 51P-1-4집 pp.28-32, 2002