

몬테카를로법을 이용한 대기압 코로나방전에 의한 N_2 의 여기·전리 분포 해석

°김경호, 고광철, 강형부
한양대학교 전기공학과

A Monte Carlo Simulation of excitation·ionization profiles of Nitrogen Gas in 1 atm. Corona discharge

°Kim Kyung Ho, Ko Kwang Cheol, Kang Hyung Boo
Dept. of Electrical Eng., HanYang Univ.

Abstract

The Monte Carlo method for studying the steady-state behavior of electrons under the influence of a electric field is described. In this simulation used a Free Flight Time technique based on determination of the increase in kinetic energy between two collisions. The electron behavior in the cathode region of a corona discharge has been analysed using this method; spatial variations of the energy and excitation, ionization, and the multiplication of electrons were discussed.

1. 서론

배기가스를 처리하는 데 있어서 지금까지는 촉매법을 많이 사용해 왔으나 이 방법은 새로운 오염물질의 발생을 야기하므로, 촉매법과 같은 효과를 얻을 수 있도록 여기나 전리를 일으켜 화학반응을 촉진하는 방전플라즈마를 이용하는 방법이 최근 활발히 진행되고 있다. 많은 반복 과정을 통해 확률적으로 다루는 몬테카를로법은 이전까지는 주로 저기압(1 Torr 이하)에서의 방전 시뮬레이션에 적용되었으나, 컴퓨터의 성능이 향상되면서 대기압에서의 방전 시뮬레이션을 수행할 수 있게 되었다. 본 논문에서는 평행 원통형 외부전극(+)에 와이어를 중심전극(-)으로 넣은 방전관을 모델로 하였다. 전계에 의해 전자만이 가속되어 질소분자와 충돌하는(Non-thermal Plasma) 코로나 방전이 일어날 때 발생된 전자의 거동을 몬테카를로 법으로 시뮬레이션하고, 이 때 질소의 여러 충돌단면적을 이용하여 각종 충돌 종류(여기, 전리 등)를 판정하고 발생하는 여기 및 전리에 대한 공간적 분포를 구하였다.

2. 몬테카를로 시뮬레이션(Monte Carlo Simulation)

전자의 거동 특성을 조사하기 위한 MCS는, i) 각각의 전자의 운동을 상세히 계산하는 기법, ii) 얻어진 데이터에서 필요한 형식으로 적당한 샘플링을 행한 전자의 거동 특성을

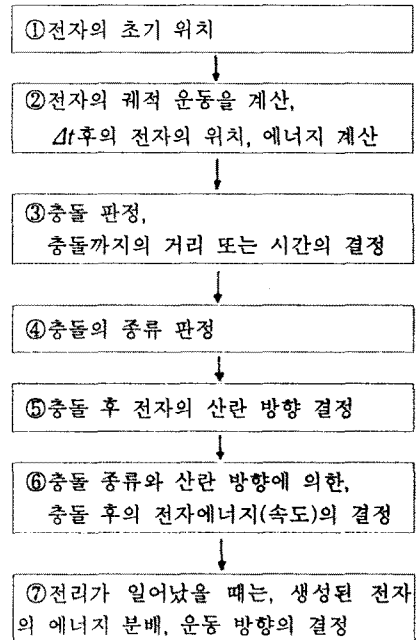


그림 1. 시뮬레이션 진행 과정

구하는 기법에 의해 구성된다. 전자는 전계가 존재하는 공간을, 가속되면서 운동하는 데, 그림1의 ②에서 ⑦까지의 과정을 반복하여 전자의 운동을 시뮬레이션하고, 난수를 이용하여 충돌을 판정한다.

2. 1. 전자의 궤적 계산

전계가 존재하는 공간에서는, 전자는 전계에 의해 가속을 받아 운동을 한다.

이 때 운동방정식은

$$m \frac{dv}{dt} = qE \quad (1)$$

로서 속도와 위치를 계산한다. 원통형 평행 전극에서 내부 도체의 반지름이 R_c , 외부도체의 반지름을 R_a 라하고, 전극간 전압을 V_0 라고 하면, 원통 중심에서 거리 r 만큼 떨어진 곳에서 공간전하를 무시했을 때 포텐셜함수는

$$\phi = \frac{V_0}{\ln \frac{R_a}{R_c}} \cdot (\ln r - \ln R_c) \quad (2)$$

이며, 전계는

$$E(r) = -\frac{V_0}{\ln \frac{R_a}{R_c}} \cdot \frac{1}{r} \quad (3)$$

(3)식을 이용하여 Δt 동안 가속된 후의 전자속도는 (1)식에 의해 구한다. 충돌 후의 운동 방향은 새롭게 난수를 이용하여 방위각과 편향각을 부여한다. 이 때는 등방산란으로 하여 각각의 각도를 주었다.

2. 2 충돌 판정

전자가 기체분자와 충돌하면, 전자는 운동에너지의 일부를 잃고, 새로운 궤도운동을 시작한다. 손실되는 에너지는, 충돌의 종류, 산란의 편향각에 의해 정해진다. 전자운동궤적 계산방법 중에서 Δt 분할법은 미소 시간 Δt 마다 난수를 발생시켜 충돌확률을 구하여 충돌의 유무를 판정하지만, Free Flight Time법(FFT법)은 1개의 난수에 의해 충돌에서 충돌까지의 비행시간(Free Flight Time)을 구하여 계산한다. 여기서는 FFT법을 이용하였다.

전자가 1초동안 충돌하는 충돌주파수 $\nu(v)$ 는

$$\nu(v) = Nq_T(v) \cdot v \quad (4)$$

여기서, N 은 기체분자수 밀도, q_T 는 전충돌단면적, v 는 전자의 속도이다. 따라서, dt 동안 충돌을 일으키는 확률은

$$dP = \nu(v) dt \quad (5)$$

이다. $t=0$ 에서 궤적운동을 시작한 전자가 시각 τ 까지 충돌하고 남는 확률은,

$$P_\tau = \exp\left[-\int_0^\tau \nu(t) dt\right] \quad (6)$$

로 나타내어 진다. 충돌을 경험하는 확률 $1 - P_\tau$, 시간 dt 동안의 충돌확률밀도 $(dP_\tau/dt) dt$ 와 난수의 발생밀도 $d\xi$ 와의 대응에 의해, $1 - P_\tau = \xi$ 인 시각 τ 에 의해 충돌을 일어남을 판정한다.

$$\int_0^\tau \nu(v) dt = \int_0^\tau Nq_T(v) \cdot v(t) dt = \ln \frac{1}{1-\xi} \quad (7)$$

(7)식에 의해 충돌사이 시간 τ 를 구한다. 적당한 크기(충돌주파수의 1/10정도)의 Δt 로서 $Nq_T(v)$ 를 적분율 한다. 좌변의 적분치(충돌확률)와 난수를 이용한 충돌확률 $\ln 1/(1-\xi)$ 값과의 크기를 비교하여 충돌을 판정한다.

이 때, 각 시각의 전자에너지의 크기에 해당하는 소충돌 단면적에 대한 좌변의 적분된 확률을 이용하여 충돌을 판정한다. 충돌이 일어났다고 판정된 경우에는 다음에 충돌의 종류를 난수를 이용하여 다시 판정한다.

2.3 충돌의 종류 판정

기체분자와 전자와의 충돌의 종류에 대해서는 탄성충돌, 비탄성충돌(여기, 전리등)이 있고, 이것들은 충돌시 전자의 속도 v (여기서는 에너지 $\epsilon = \frac{1}{2}mv^2$)에 의해 변하고, 충

돌단면적 $q_k(\epsilon)$ 에 의해 기술된다. 이것은 미분단면적 $\sigma_k(v, \omega)$ 를 전 입체각에 대해 적분을 하여 얻어지는 적분 단면적이다. 따라서 충돌시의 전자에너지 ϵ' 에 의해 탄성충돌, 여기충돌(간단히 1종류만 고려) 및 전리충돌이 일어나는 전충돌단면적은,

$$q_T(\epsilon') = q_{el}(\epsilon') + q_{ex}(\epsilon') + q_i(\epsilon') \quad (8)$$

이다. 여러 충돌단면적과 전충돌단면적과의 비와 발생된 난수 ξ 를 비교하여 충돌 종류를 판정한다. 즉,

탄성 충돌:

$$\xi \leq q_{el}(\epsilon')/q_T(\epsilon')$$

여기 충돌:

$$q_{el}(\epsilon')/q_T(\epsilon') < \xi \leq [q_{el}(\epsilon') + q_{ex}(\epsilon')]$$

전리 충돌:

$$\xi > [q_{el}(\epsilon') + q_{ex}(\epsilon')]$$

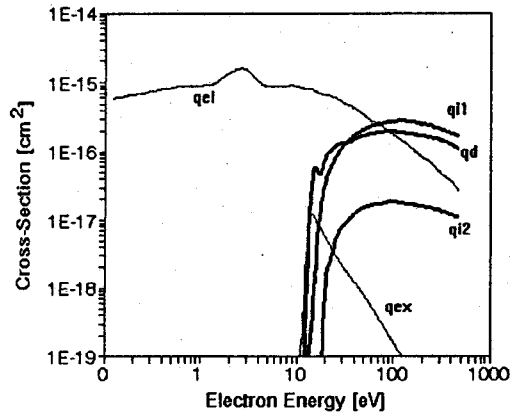


그림2. 충돌판정에 이용한 충돌단면적

로서 판정한다. 충돌 종류의 판정은 충돌시의 전자에너지에 해당하는 충돌단면적에 따라서 탄성 충돌, $C^3\Pi_u$ 준위로의 여기, $X^2\Sigma_g^+$ 준위로의 전리, $B^2\Sigma_u^+$ 준위로의 전리 및 이 단면적의 총합과 전 단면적과의 차를 또 하나의 새로운 단면적으로 보아 이용하였다. 여기 또는 전리충돌로 판정되었다 하더라도 전자에너지의 크기가 여기 또는 전리되는 에너지 값보다 작은 경우 또한 탄성충돌로 판정하였다. 계산에 쓰인 전체 단면적의 크기를 그림2에 나타내었다.

2.4 충돌 후 산란 방향 결정

충돌 후의 에너지는 탄성충돌의 경우에는 운동량 보존식을 이용하여 계산하였고, 여기충돌의 경우에는 반응에 필요한 문턱 값을 충돌 전의 에너지에서 빼고 남은 에너지를 유지하며 운동하는 것으로 하였다. 전리충돌이 일어났을 때는 새로운 전자를 공간에 배치시키고 원래의 전자와의 사이에서 남은 에너지를 난수를 이용하여 분배하였다. 충돌 후의 산란방향은 등방산란을 가정하였다.

3. 시뮬레이션 결과 및 고찰

몬테카를로법을 이용하여 공간에 대한 전리 및 여기충돌위치와 충돌반응 횟수를 구하여 그림3, 그림4에 나타내었다. 모의실험에서 나타난 결과는 전리 또는 여기반응은 인가한 전압이 큰 경우가 더욱 많은 값을 나타내지만, MCS에서 구한 충돌횟수를 정량적으로 해석하기 어려우므로 정성적인 충돌반응을 알아보기 위하여 인가한 각 전압에서 전자가 양극에 도달할 때까지 일으킨 여기, 전리반응의 전체 수를 가지고 각 공간에 대하여 발생한 충돌반응 횟수를 나누어 정규화 하였다. 코로나 방전이 일어나는 전압의 범위에서는 인가전압의 크기에 큰 영향을 받지 않고 전리반응이 전체가 강한 내부 전극부근에서만 일어남을 알 수 있다. 하지만 여기반응은 인가전압의 크기에 따라서 반응이 일어나는 거리가 길어짐을 알 수 있다.

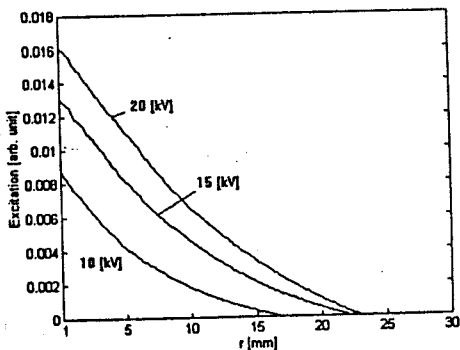


그림3. 전극 사이 공간에 대한 여기분포

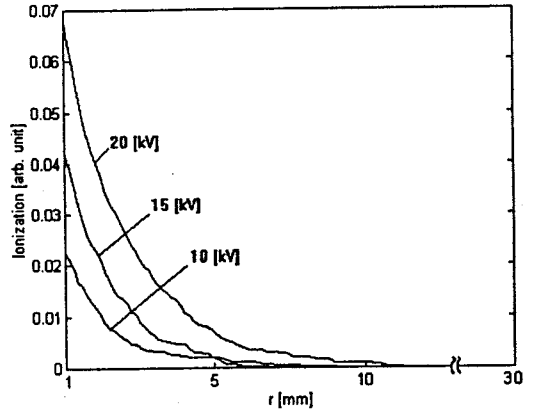


그림4. 전극 사이 공간에 대한 전리분포

코로나를 이용한 배기가스처리기술에서는 방전관을 흐르는 배기가스가 코로나방전 후 주입된 NH_3 와 반응을 촉진할 수 있도록 하기 위해서는 여기, 전리반응의 얼마나 일어나는가를 알 수 있는가가 중요하다.

이후로 실제 배기가스에 대한 충돌단면적이 구해지면 코로나방전을 이용하는 배기가스처리에 있어서 여기서 행한 시뮬레이션을 이용하여 각 조건에 따른 여기와 전리에 대한 데이터를 얻을 수 있다.

참고문헌.

- [1] M.Nakamura et al. "Cross Section for Collisions of Electrons and Photons with Nitrogen Molecules", J.Phys.Chem.Ref.Data, Vol.15, No.3, pp.985-1009, 1986
- [2] J. P. Boeuf and E. Marode, "A Monte Carlo analysis of an electron swarm in a non-uniform field:the cathode region of a glow discharge in helium", J. Phys.D: Appl. Phys., vol.15, pp.2169-2187, 1982
- [3] Jen-Shih Chang, "Corona Discharge Processes", IEEE Trans. on Plasma Science, Vol. 19, No. 6, pp.1152-1166, 1991
- [4] 氣體放電シミュレーション技法調査専門委員會編「氣體放電シミュレーション技法」日本電氣學會技術報告 II部 第140號. 日本電氣學會.pp.22-36, 1982.
- [5] The Japan Research Group of Electrical Discharges, "放電研究", 第145號, pp33-42, 1994