

대기중에서 스트리머성장에 대한 시뮬레이션

송봉식, 민웅기*, 이석현
인하대학교 전기공학과, *서울대학교 전기공학부

The Simulation of Streamer development at Air

Bong-Shik Song, Woong-Gee Min*, Seok-Hyun Lee
Inha University, Seoul National University*

Abstract - In this paper we present not only propagation of streamer but also chemical processes in air. The results of two-dimensional simulation are that chemical species have different densities in spatial domain and temporal domain. We show that photoionization plays important roles in streamer propagation and chemical reactions.

1. 서 론

최근에는 스트리머의 화학적 성질을 이용한 산업적 응용에 대한 연구가 활발히 진행되고 있다[1]. 스트리머는 음극성 스트리머와 양극성 스트리머로 나눌 수 있다. 광전리현상은 스트리머의 진행에 중요한 역할을 한다. 음극성 스트리머는 원리상으로 광전리없이도 진행할 수 있으나 양극성 스트리머는 광전리현상이 필수적이다. 그러나 광전리를 고려하기 위해서는 많은 계산량과 메모리가 필요하므로 지금까지는 광전리현상을 1차원으로 근사화해왔다. 그러나 본 논문에서는 충분한 메모리와 고속 프로세서를 사용하여 2차원광전리현상을 고려한 음극성 스트리머로의 천이를 시뮬레이션하였다. 2차원 해석에 있어서 광전리현상에 대한 모델은 Kulikovsky에 의해 제시된 방법을 적용하였다[2]. Zheleznyak의 이론에 따르면 이온이 전체에 의해 가속된 전자는 질소가스를 여기시키며 이때 여기된 질소분자는 기저상태로 천이되면서 자외선을 방사하게 된다. 이때 방사된 광자의 파장은 980-1025 Å이며 Berdge-Hopfield band영역에서 질소분자가 흡수하는 것이 아니라 불순물인 산소분자가 대부분 흡수하게 된다. 즉 광전리현상은 불순물인 산소분자가 일어난다. 본 논문에서는 공기, 즉 질소 80.0%와 산소 20.0%를 모델링하였으며 광전리를 고려한 기체방전을 모델링하였다. Kulikovsky방법에서는 광전리를 고려할 때 일정한 반경내의 절점을 균일한 source로 가정하여 Z축에 대한 적분으로 간략화한 방법을 사용하였다. 그러나 본 연구에서는 충분한 메모리를 사용하여 모든 요소를 광전리의 source와 target으로 하였다. 기체방전을 해석할때는 하전입자에 대한 연속방정식과 포아송(Poisson)방정식을 푸는 과정이 필요하다. 연속방정식은 대류항이 지배적인 1차의 쌍곡선 형태이므로 그 해는 공간에 대해 매우 큰 변화율을 가지게 되며 큰 변화율을 가지는 해석영역에 있어서는 높은 해상도를 요구하게 된다. 구조화된 요소망을 사용하는 유한차분법의 경우는 불필요한 영역에서 계산시간이 증가된다. 이러한 문제에 대해 계산시간을 줄이면서 정확한 해를 구하기 위해서 본 연구에서는 유한차분법에 기초한 Flux-corrected Transport 알고리즘을 유한요소법(Finite Element Method)에 적용한 FEM-FCT를 사용하였다[3]. 화학적 반응을 적용함에 있어 지금까지 스트리머해석에 있어서 단순한 이온과의 재결합을 근사함으로써 생기는 스트리머의 진행에 있어서의 오차를 줄이고 플라즈마의 화학적 계산을 위하여 각각의 화학종에 따라 구별함으로써 각각의 생성물을 계산하였다. 이러한 계산은 각각의 화학종

에 생성과 소멸에 있어서 중요한 역할을 하므로 지금까지의 무시해 왔던 화학적 반응을 계산함으로써 코로나의 물리적 해석 뿐만 아니라 각각 이온에 대하여 화학적 반응을 고려하였다. 코로나의 진행하는 수 nano sec 시간범위에 있어서 전자만의 운동으로 생각할 수 있다. 즉 이온, 중성입자들의 정지상태로 가정할 수 있으며 이때의 거시적 성질을 결정할 수 있으며 Boltzmann equation 또는 Monte Carlo simulation으로 구할 수 있다. 화학적 반응에 있어 전자와 배경가스와의 반응 충돌계수는 전자에너지 분포함수(Electron Energy Distribution Function)에 의존하며 본 논문에서는 Boltzmann equation을 사용하였다.

2. 본 론

2.1 지배방정식

전자사태에서 스트리머를 천이하는 시간은 수 nsec이 기 때문에 전자만의 운동을 고려한 지배방정식은 다음과 같다.

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot (n_e v_e) - \nabla \cdot (D \nabla n_e) = S_p + S_i - S_{att} - L_{ep} \quad (1)$$

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} = S_p + S_i - L_{ep} - L_{pm} \quad (2)$$

$$\frac{\partial n_n}{\partial t} = S_{att} - L_{pn} \quad (3)$$

$$\nabla^2 \phi = -\frac{e}{\epsilon_0} (\sum n_p - n_e - \sum n_n) \quad (4)$$

$$E = -\nabla \phi \quad (5)$$

식(1)~(5)에서 t는 시간, n_e, n_p, n_n 는 전자, 양이온, 음이온의 밀도를 나타낸다. S_i 는 이온화에 의해 전자가 생성되는 항, S_p 는 광전리에 의해 전자가 생성되는 항, S_{att} 은 흡착에 의해 음이온이 생성되는 항을 나타낸다. 그리고 L_{ep} 는 전자와 양이온과의 재결합에 의해 전자가 소멸되는 항이며 L_{pm} 은 양이온과 음이온에 의해 소멸되는 항을 나타낸다.

한편 포아송 방정식은 전자, 음이온과 양이온의 합이 source항으로 작용한다. 식 (4), (5)에서 ϕ 는 전위, E는 전계, ϵ_0 은 유전율, e는 기본전하량이다.

초기밀도조건으로 $1.0 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ 인 반경 0.005cm의 중성 플라즈마를 가우시안 분포(Gaussian distribution)로 음극표면에 위치시켰다. 초기의 전자수는 약 35개이다. 그리고 초기에 있어서 이온의 생성은 산소 양이온으로 가정하였다. 초기의 밀도가 작기 때문에 화학종 조성비는

화학반응에 많은 영향을 미치지 않는다.

$$V|_{z=0} = V_0, \quad V|_{z=d} = 0 \quad (6)$$

식(6)에서 R은 계산영역이며 d는 전극간격, V_0 는 인가전압이다

지금까지는 많은 수치해석논문에서는 화학적 반응에 대하여 무시하였거나 근사화해왔기 때문에 실제 화학종에 대한 계산을 할 수가 없었다. 그러나 본 연구에서 31종의 화학종과 251개의 화학반응을 고려하였으며 광전리 효과를 2차원적으로 모델링하였다. 그리고 화학반응에 있어 전자와 배경가스(질소, 산소)와의 반응계수는 전자 에너지분포함수에 의존한다. 본 연구에서는 이러한 반응계수를 ELENDF 프로그램을 사용하여 계산하였다[4].

2.2 수치해석

각각 화학종의 밀도에 대한 상미분방정식은 CVODE를 사용하여 밀도를 구하였다. CVODE는 non-stiff와 stiff한 상미분방정식에 적용할 수 있는 solver로 Jacobian 행렬을 사용하여 밀도를 계산한다. 배경가스 온도는 스트리머 진행에 있어서 중요한 변수로 작용한다. 최근의 논문에 의하면 대기압상의 온도에 따라 스트리머 속도 등 물리적 현상에 영향을 주고 있음이 보고되고 있다. 가스방전동안에 시스템에 약간의 온도변화가 일어난다. 그러나 약간의 온도변화는 무시할 정도이며 온도는 300K로 하였다.

기존의 2차원 스트리머 시뮬레이션은 유한차분법(Finite Difference Method)을 사용해 왔다. 유한차분법은 해석 공간을 균일한 격자로 분할하기 때문에 특정 영역에서 해상도를 높이기 위해서는 전체적으로 많은 격자가 필요하다. 반면 유한 요소법(Finite Element Method)은 구조화되지 않은 격자를 사용하기 때문에 모델의 형상을 쉽게 고려할 수 있을 뿐만 아니라, 물리량이 급변하는 영역을 세밀화 함으로써 계산시간을 줄일 수 있다.

2차원 포아송 방정식에서 전위를 구하기 위해서 ICCG 방법 (Incomplete Cholesky for Conjugate Gradient)을 사용하였다. 유한요소해석에 있어서 iteration solver로써 Conjugate Gradient 방법은 빠른 수렴성 때문에 많이 사용되고 있으며 ICCG는 수렴성 향상에 있어 sparse 시스템에 유용한 방법이다. 그리고 연속방정식에 있어서 Lohner에 의해 발전된 FEM-FCT 알고리즘을 사용하였다. 확산에 대한 간단한 형태는 lumped mass 행렬과 consistent mass 행렬의 차에 의해서 얻을 수 있다.

그림 1은 평판대 평판 전극구조에서 요소분할도를 나타내고 있다. 음극영역에서 높은 해상도를 갖고 있으며 양극에서는 거친 요소망을 나타내고 있다.

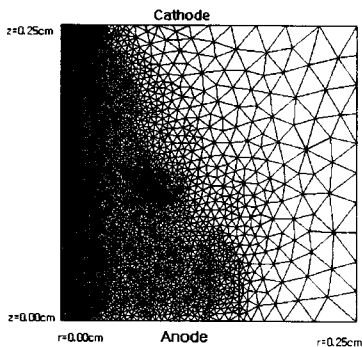


그림 1 평판전극의 요소분할도

2.3 시뮬레이션 결과

본 연구에서는 대기압상태인 P=760 Torr, 가스온도

$T=300K$ (질소가스밀도 $2.45 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$), 전극간의 간격 $d=0.25 \text{ cm}$, 인가 전압 14 [kV]이다. 그림 3은 E/N에 따른 여러 화학종의 생성율을 나타내고 있다. 높은 전계에서는 전자들은 높은 에너지를 외부 전계로부터 받으므로 여러 화학종을 보다 많이 생성시킨다. 외부인가 전계가 높을수록 생성율도 증가함을 알 수 있다. 즉 오염물질 제거에 필요한 화학종을 생성시키기 위해서는 높은 전압을 인가해야함을 알 수 있다.

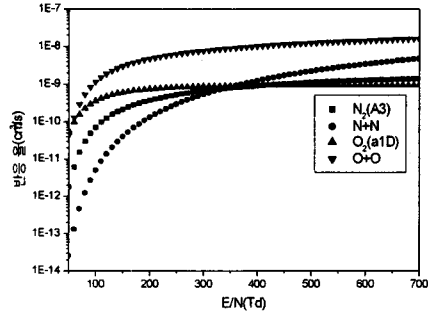
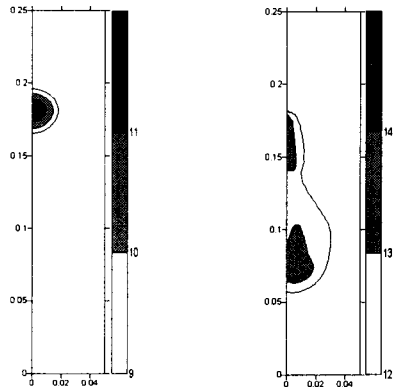


그림 2 E/N에 따른 여기종의 생성율

그림 3은 초기의 전자사태에서 스트리머로 천이하는 과정에서의 화학종의 분포를 나타낸 것이다. 그림 3에서 알 수 있듯이 약 6 nsec 이후에는 내부적으로 균일한 밀도의 플라즈마가 존재한다. 스트리머 내부는 전자, 음이온 그리고 양이온이 중성플라즈마 상태로 존재하며 이때부터 전자사태는 스트리머로 천이하게 된다. 그리고 스트리머는 양극 방향뿐만 아니라 음극 방향으로도 진행하게 된다. 즉 음극성 스트리머와 양극성 스트리머가 동시에 존재하게 된다.



(a) t=4 nsec

(b) t=6 nsec

그림 3 시간에 따른 전자밀도 분포

직접적 이온화와 광전리를 통해서 생성된 질소이온과 산소이온은 재결합(Recombination)과 전하 전환 과정(Ion Conversion process)을 거쳐 복잡한 화학종을 생성시킨다. 그림 4와 5에서 알 수 있듯이 이온과 중성종의 밀도분포는 대체로 전자밀도 분포에 의존한다. 이는 스트리머에 의한 방전이 매우 짧은 시간에 이루어지기 때문에 전자에 비해 이동도가 낮은 이온과 중성종은 정지상태로 가정했기 때문이다. 실제 스트리머를 이용한 오염물질 제거에 있어서는 초기 방전 시에 생성된 전자, 이온, 그리고 여기종 등이 수 msec ~ 수 sec 동안의 반응을 통해서 여러 가지 화학종으로 환원된다

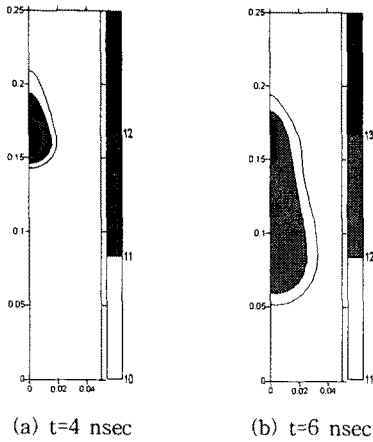


그림 4 시간에 따른 O3의 밀도분포

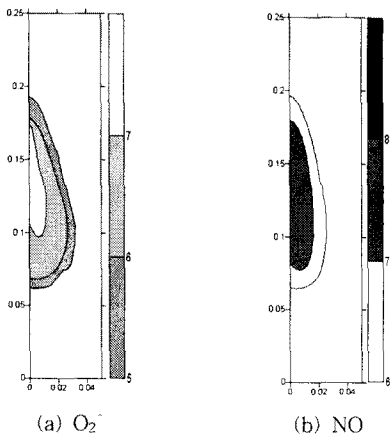


그림 5 6nsec일 때 화학종의 밀도분포

그림 6은 시간에 따른 광전리에 의해 생성된 전자밀도를 나타낸 것이다. 여기종은 전계에 비례하므로 전계가 강한 부근에서는 광전리효과도 강하게 된다.

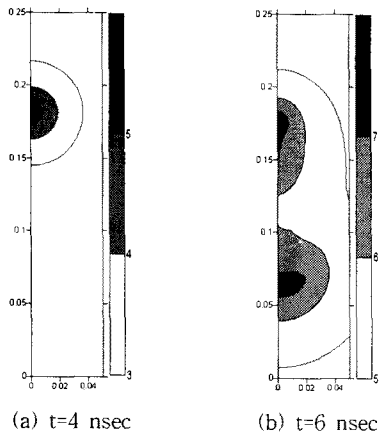


그림7 시간에 따른 광전리에 의해 생성된 전자밀도분포

그림 8은 z축상에서 전계분포를 나타낸 것이다. 전자 사태에 의해 전자가 높은 밀도를 갖게 되면 외부인가 전계와 비슷한 크기를 갖게 되면 스트리머로 천이하게 된다. 한편 스트리머 내부는 중성플라즈마 상태로 외부 전계를 차폐하게 된다.

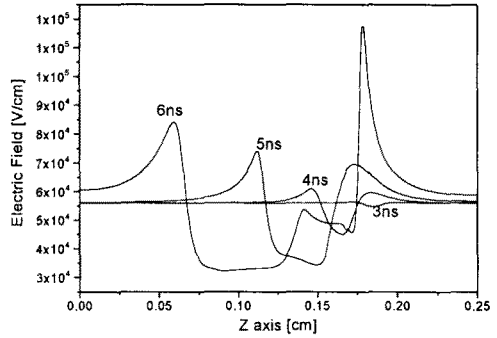


그림 8 Z 축상에서 전계의 세기 분포

3. 결 론

본 연구는 공기를 배경가스로 2차원 가스방전해석에 있어서 연속방정식과 포아송 방정식을 푸는 과정에서 유한요소법에 기초해서 구조화되지 않은 요소를 사용함으로써 계산시간을 줄임과 동시에 필요한 영역에서 높은 해상도를 갖는 결과를 얻었다. 그리고 2차원적인 광전리효과를 고려하여 생성된 화학종을 확인함으로써 스트리머의 화학적 반응을 알아보았다.

- 본 연구에서 수행한 결과를 정리하면 다음과 같다.
- (1) 광전리효과로 인해 양방향으로 스트리머가 진행함을 알 수 있다.
 - (2) 스트리머 내부의 화학적인 조성비는 전자와 음이온으로는 직접적 흡착에 의한 O₂와 양이온으로는 N₄⁺, O₂⁺, N₂⁺가 상당 부분을 차지한다.
 - (3) 초기에 오염물질이 없더라도 스트리머 방전을 통해 자연적으로 NO가 발생된다.

[참 고 문 헌]

- [1] Akira Mizuno, "NOx Removal Process Using Pulsed Discharge Plasma", IEEE Transactions on Plasma Science, vol. 31, no. 3, pp. 957-962, 1995.
- [2] A. A. Kulikovskiy, "The role of the absorption length of photoionization radiation in streamer dynamics in weak field", J.Phys. D: Appl. Phys., 33, L6~8, 2000.
- [3] 민용기, 김형석, 이석현, 한송엽, "FEM-FCT 기법을 이용한 코로나방전 시뮬레이션에 대한 연구", Trans. KIEE, vol 48 no. 3, pp. 200-208, 1999.
- [4] W. L. Morgan and B. M. Penetrante, "ELENDF: A time-dependant Boltzmann solver for partially ionized plasma", Computer Physics Communications, vol 58, pp. 127-152, 1990