

# MCS-BE<sub>q</sub> 알고리즘에 의한 SF<sub>6</sub>-Ar 혼합기체의 확산계수

(Diffusion Coefficients in SF<sub>6</sub>-Ar Gas used by MCS-BE Algorithm)

김상남

(Sang-Nam Kim\*)

시립인천전문대학

## Abstract

This paper describes the electron energy distribution function characteristics in SF<sub>6</sub>-Ar gas calculated for range of E/N values from 50~700[Td] by the Monte Carlo simulation(MCS) and Boltzmann equation(BE) method using a set of electron collision cross sections determined by the authors and the values of electron swarm parameters are obtained by time of flight(TOF) method.

In this dissertation the results of the combined experimental and theoretical studies designed to understand and predict the spatial growth and transport coefficients for electrons in SF<sub>6</sub> and SF<sub>6</sub>-Ar mixtures have described.

The ionization and attachment coefficients in pure SF<sub>6</sub> and SF<sub>6</sub>-Ar mixtures have been calculated over the range of 10<E/N<600Td by the two term Boltzmann equation and by the Monte Carlo Simulation using a set of electron collision cross sections for SF<sub>6</sub> molecule and for Ar atom proposed by other authors.

The results obtained in this work will provide valuable information on the fundamental behaviors of electrons in weakly ionized gases and the role of electron attachment in the choice of better gases and unitary gas dielectrics or electro negative components in dielectric gas mixtures.

## 1. 서론

시설물이 점차 대형화되고 건축물에서 사용하는 전기용량도 증가됨에 따라, 생산성을 고려한 산업 발전과 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 메카니즘을 정확히 이해할 필요가 있으며 이를 위하여 이론적, 실험적 수치 해석적으로 많은 연구를 필요로 하고 있다 [1][2][3].

현재 아크 소호 매체로 쓰이고 있는 SF<sub>6</sub>가스는 열적, 화학적으로 안정도가 높은 화합물로서 불활성의 불연, 무오, 무독, 무색의 기체로써 이는 불소의 성질이 자유전자를 잘 끌어당기기 때문에 SF<sub>6</sub> 분자는 무거운 이온이 되어 잘 움직이지 않아 우수한 절연내력을 발휘하는 것이다. 하지만 SF<sub>6</sub>가스의 가격은 상당히 고가이므로 이를 대체하기 위

해 저가의 다른 기체와의 혼합에 의한 가격의 절감이 특히 요구되고 있는 실정이다. 이 때문에 이러한 혼합기체의 특성을 고가의 실험장비 없이 컴퓨터 시뮬레이션만을 이용하여 해석해 내는 것이 현재 일본과 국내에서도 진행이 되고 있는 실정에 있다.

그러나 국내에서는 대부분 단일 절연기체를 이용하여 임계절연 파괴강도에 관한 연구가 실험적, 이론적으로 되었을 뿐 SF<sub>6</sub>-희가스 혼합기체 중에서의 전자수송 특성에 관한 연구는 거의 미흡한 실정에 있으며 더욱이 기체 방전현상으로 전리되는 플라즈마 프로세싱에 관한 연구는 더욱 미흡한 실정이다.

이와 같은 전자 수송특성을 해석하기 위해서는 정확한 운동량 변환 단면적이 필요하고 이들 값을 이용한 전자군 파라미터의 특성이 볼츠만 방정식과 몬테칼로 시뮬레이션에 의해 구해진다. 특히 몬테칼로법은 가스의 탄성 및 비 탄성 충돌을 고려한 비평형 상태의 비교적 높은

E/N[Td]영역의 범위에서 낮은 전리로 전자군 파라미터와 전자 에너지 분포함수를 해석하는 가장 우수한 방법이다.[4]

본 연구에서는 SF<sub>6</sub>와 He를 혼합한 혼합기체의 전기 전도 특성을 나타내는 전리계수 ( $\alpha/N$ ), 부착계수 ( $\eta/N$ ), 실효 전리 계수 ( $(\alpha - \eta)/N$ ), 전자 이동속도(W), 전자의 확산계수(ND<sub>L</sub>) 및 평균에너지 등의 전자수송계수를 E/N[Td]:50~700[Td] (E:전계, N:기체분자수밀도, 1Td=1×10<sup>-17</sup> V·cm<sup>2</sup>, N:3.5353×10<sup>16</sup>cm<sup>-3</sup> 0°C 1Torr에 해당)의 범위에서 볼츠만 방정식에 의한 Backward prolongation법과 비등방성 산란을 고려한 몬테칼로 시뮬레이션을 TOF 샘플링에 의해서 계산한다.

본 시뮬레이션에서는 TOF (Time of Flight) 샘플링에 의하여 물리량 등과 전자 궤도에서 전리가 일어난 경우에 2차 전자 [NN(Tmax<sub>1</sub>을 20등분)], 난수(Random Number:13)등을 양극(콜렉터)에 도달할 때까지 반복 추적하였다. 그리고 FORTRAN 77프로그램을 이용한 몬테칼로 시뮬레이션은 전자계산기 SPARC WORKSTATION (SS-20)을 사용하여 계산하였다.

## 2. 시뮬레이션 이론

### 2.1 MCS법

MCS은 난수(Random Number)를 이용하여 충돌의 종류, 산란후의 방향 및 비행시간 등을 결정하면서 전자의 운동을 반복 추적한다. 또한 전자군의 성질을 조사하기 위한 몬테칼로법은 전자계내의 전자운동상태와 분자의 충돌산란확률을 고려하여 전자, 이온의 상태량을 추적하는 것을 기본으로 하여 입자를 확률현상의 난수로 모의하는 방법을 말한다. 사용하는 난수는 컴퓨터에서 발생하는[0~1]사이의 의사난수(Pseudo random number)이다.[5][6]

MCS은 확률론적인 기법을 이용하기 때문에 얻어진 결과로부터 통계적인 분산이 생기는 단점이 있다. 이 때문에 신뢰되는 파라미터를 구하기 위해서는 충분한 샘플수를 확보할 필요가 있다.

전자군에 대한 관측방법으로는 TOF, PT, SST 등이 있다. 몬테칼로 시뮬레이션에 있어서도 data 샘플링을 이들 관측법에 의해서 행한다. 3종의 관측법 중에 PT, SST에서는 계산을 행한 전자수가 그대로 샘플수로 생성되어 얻어지지만 TOF에서는 위치와 시간을 같이 지정하기 때문에 샘플수는 작게 된다. 더욱이 에너지 분포를 구하는 경우 샘플

수는 점점 작게 되고 통계적 변동을 많이 포함한 결과가 되기 쉽다. 그것을 방지하기 위해 전자수를 많게 계산하는데 그것에 비례하여 계산기 시간도 증가한다.[7][8]

### 2.2 BE법

기체중의 방전현상을 원자론적인 입장에서 보면, 상호 충돌을 되풀이하는 하전입자 즉 전자, 원자, 분자, 이온에서 성립되며, 이들 하전입자는 전자군의 속도와 위치 및 시간에 따라 분류할 수 있는데, 하전입자가 열 평형 상태에 있는 경우를 제외하고는 전자의 운동 중 충돌에 의한 임의의 속도와 임의의 위치에 있는 전자의 수가 시간에 따라 변화한다.

본 논문에서는 볼츠만방정식에 의한 전리, 부착계수의 수치해석은 Philip E. Luft의 Backward prolongation계산법을 이용하였다.[9] 또한 전자가 음극에서부터 양극에 도달할 때까지 SPARC WORKSTATION(SS-20)으로 반복 추적하여 계산하였고 그림2.1은 본 시뮬레이션 전체의 개략적인 흐름을 나타내었다.

## 3. 전자의 충돌 단면적

### 3.1 SF<sub>6</sub> 기체에서 전자의 충돌 단면적

본 연구에 이용한 SF<sub>6</sub>의 전자 충돌 단면적은 H. Itoh et al.에 의한 것을 사용하였으며 그림 3.1에 나타내었다[6,7].

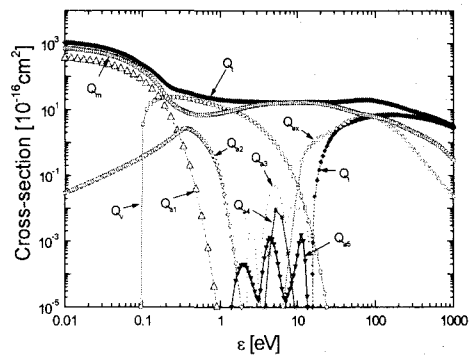


그림 3.1 SF<sub>6</sub> 기체에서 전자의 충돌 단면적  
Fig. 3.1 Collision cross sections of SF<sub>6</sub>

이 SF<sub>6</sub>의 전자 충돌 단면적은 다른 원자, 분자

에 비하여 전자 부착단면적 ( $Q_{a1}$ ,  $Q_{a2}$ )이 매우 크므로 낮은 에너지영역에 존재하며, 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 진충돌 단면적( $Q_r$ ) 등의 값을 이용하여 계산하였다[7].

### 3.2 Ar 기체에서 전자의 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[6].

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. 그리고 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 측정한 결과를 이용하였다[8].

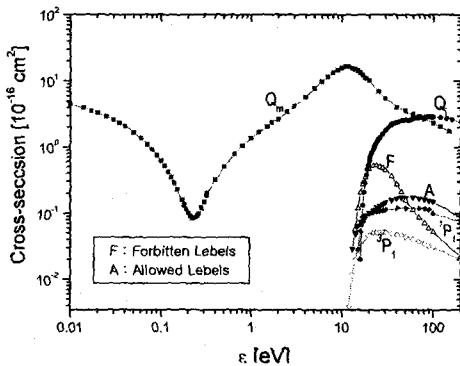


그림 3.2 Ar기체의 전자 충돌단면적.  
Fig. 3.2 Collision cross sections of Ar

## 4. 결과 및 고찰

그림 4.1과 그림4.2는 SF<sub>6</sub>-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.

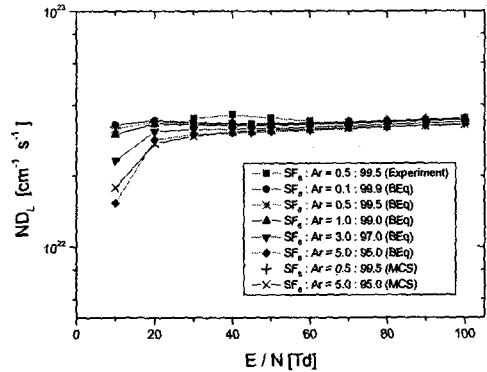


그림 4.1 SF<sub>6</sub>-Ar 혼합기체에서 종방향 확산계수  
Fig.4.1 Longitudinal diffusion coefficients of SF<sub>6</sub>-Ar

이 때 하전입자 밀도의 구배와 전계가 동시에 존재하는 공간 내에서 하전입자의 거시적 운동이 일어나지 않는 평형상태에서는 거의 균일한 밀도 분포가 나타난 것으로 본다.

이것은 열평형 상태에 있는 하전입자 밀도의 공간 분포로서 볼츠만 분포를 갖는다[9~14].

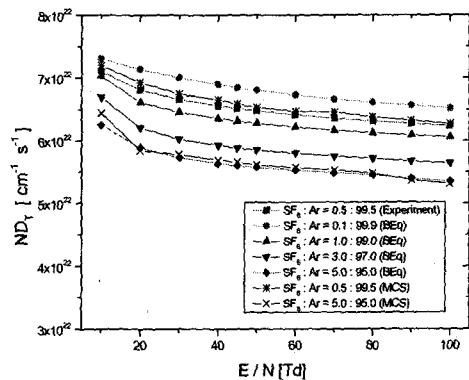


그림 4.2 SF<sub>6</sub>-Ar 혼합기체에서 횡방향 확산계수  
Fig. 4.2 Transverse diffusion coefficients of SF<sub>6</sub>-Ar

## 5. 결론

본 연구는 탄성 및 비탄성 충돌 단면적과 전

리증식의 전자군을 형성하는 E/N[Td] 영역에서 혼합기체의 혼합비에 따른 전리, 부착, 실효전리계수 및 전자수송계수를 볼츠만 방정식과 몬테칼로 시뮬레이션을 이용한 이론 해석과 전자도착 시간 분포를 측정하는 실험장치에 의해 해석한 결과 다음과 같은 결론을 얻었다

본 연구는 인천전문대학 교내 연구비 지원에 의한 논문임

참 고 문 헌

1. 전리계수의 해석 결과는 순수 SF<sub>6</sub>에서 E/N [Td]증가에 따라 증가 하였고, Ar기체에서는 낮은 E/N[Td]에서 급격한 증가를 하다가 E/N=100[Td]이상에서는 완만한 증가를 하였고, SF<sub>6</sub>-Ar 혼합기체에서는 낮은 E/N[Td]에서는 완만한 증가를 하다가 E/N=40[Td] 이상에서는 비례하여 증가하였다. 결과적으로 순수 SF<sub>6</sub> 에 비해 혼합기체의 전리계수가 증가함을 확인하였다.
2. SF<sub>6</sub>, Ar 순수기체 및 SF<sub>6</sub>-Ar 혼합기체에 대해 E/N=10~600[Td]범위 내에서 종·횡 방향 확산계수를 구하였다. 결과, 측정범위에서 실험 값과 거의 일치함을 입증하였다.
3. 확산계수의 해석 결과는 혼합기체에서의 종방향 확산계수는 큰 변화가 없었고, 횡방향 확산계수는 완만하게 감소함을 확인하였다.
4. 전자 에너지 분포 함수는 평균 에너지가 평형 상태인 경우 Sample=14, L=2.6[cm]에서 2항근사의 볼츠만 법에 의한 등방 성분(F<sub>0</sub>)과 비등방 성분(F<sub>1</sub>)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 수송계수를 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.

- [1] H. Itoh, Y. Miura, N. Ikuta, Y. Nakao and H. Tagashira, "Electronswarm development in SF<sub>6</sub> : I. Boltzmann equation analysis" Phys. D:Appl. Phys 21, pp.922-930, 1988.
- [2] 電氣學會技術報告, "氣體放電シミュレーション 技法" 第140號, 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續の推定に關して"放電研究會資, ED-86-116, pp.39~49, 1986.
- [4] 森 正武. Fortran 77 數値計算プログラミング (岩 波書店), pp.41~44, 1995.
- [5] A. Von Engle, "Ionized Gases", Oxford University Press, 1965.
- [6] 市川行和, 高柳和夫, 島材勳, "衝突の理論(上下)", 吉岡書店, pp.192, 1975.
- [7] 高柳和夫, "電子, 原子, 分子の衝突", pp.51~69, 培風館, 1978.
- [8] H. Itoh and T.Musha "Monte Carlo Calculations of Motions in Helium", J.Phys. soc. japan, Vol.15, No.9, pp.1675-1680, 1960.
- [9] 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.
- [10] Philip. E. Luft, "Description of a Backward prolongation program for computing transport coefficients", JILA, information center report, No.19, 1975.
- [11] M. Hayashi, and S. Hara, Joint Symposium on Electron and Ion Swarm and Low Energy Electron Scattering, A Satellite of ICPEAC XVII, Proc pp.109-111, 1991.
- [12] 河聖哲, 徐相賢, "SF<sub>6</sub>가스의 電子輸送特性에 관한 몬테칼로 시뮬레이션" 韓國電氣電子材料學會誌, Vol. 9, No. 7, pp.660-667, 1996.
- [13] 金相南 "SF<sub>6</sub>-Ar 混合氣體에서의 電離와 附着係數" 工學博士 學位論文, 東國大學校, 2000
- [14] 金相南, 河聖哲, "SF<sub>6</sub>가스의 電子에너지 分布函 數에 관한 研究", 韓國조명·電氣設備學會誌, Vol. 23-2-14, pp.227-233, 1999.