

Санкт-Петербургский государственный университет

НАПАЛКОВ Олег Георгиевич

Выпускная квалификационная работа

***Исследование СВЧ разряда в воздухе на основе расширенной
гидродинамической модели***

Уровень образования: магистр

Направление *01.04.03 «Механика и математическое моделирование»*

Основная образовательная программа *ВМ.5506.2021 «Механика и
математическое моделирование»*

Научный руководитель:
профессор кафедры
гидроаэромеханики, д.ф.-м.н.,
профессор, Кустова Е.В.

Рецензент:
доцент кафедры общей
физики КНИТУ-КАИ им. А.Н.
Туполева, к.ф.-м.н.
Сайфутдинов А.И

Санкт-Петербург

2023

SAINT-PETERSBURG STATE UNIVERSITY

Mechanics and Mathematical Modelling

Mechanics and Mathematical Modelling

Oleg Napalkov

Study of microwave discharges in air on the basis of extended hydrodynamic
model

Master's Thesis

Scientific supervisor:

Head of Fluid Mechanics Department

Doctor of Physical and Mathematical Sciences

Elena Kustova

Reviewer:

Docent of Department of General Physics

of Kazan National Research Technical University

named after A. N. Tupolev

Candidate of Physical and Mathematical Sciences

Almaz Saifutdinov

Saint-Petersburg

2023

1. Оглавление

1.	Оглавление	3
2.	Аннотация	4
3.	Введение.....	6
4.	Теоретическая модель.....	7
4.1.	Основные уравнения.....	7
4.2.	Граничные условия	10
4.3.	Геометрия.....	11
4.4.	Плазмохимия	11
5.	Результаты.....	16
6.	Заключение	24
7.	Список использованной литературы.....	25

2. Аннотация

Данная работа посвящена моделированию сверхвысокочастотного плазменного разряда в воздухе на основе расширенной гидродинамической модели. Целью работы является изучение влияния различных физико-химических процессов на газодинамические параметры. Была составлена численная модель прохождения смеси газов азота и кислорода через СВЧ плазменный реактор, в котором под действием СВЧ излучения частотой 2.45 ГГц происходит разряд. Модель строится на основе сокращённого набора плазмохимических реакций, в который входят ионизация атомов и молекул азота и кислорода, возбуждение электронных степеней свободы, диссоциация молекул, их рекомбинация, а также другие плазмохимические реакции. Расчёт был произведён для двух значений давления: 150 Торр и 760 Торр. В результате были построены графики и поля распределения таких параметров как плотность электронов, температура газа, мощности источников нагрева для каждого механизма. На основе анализа этих графиков были сделаны выводы об влиянии давления и механизмов нагрева на параметры плазмы.

Ключевые слова: плазма, гидродинамика, плазменный разряд, свч-плазма, численное моделирование, быстрый нагрев.

The present study is devoted to modeling a high-frequency plasma discharge in air based on an extended fluid-dynamic model. The aim of the work is to study the influence of various physico-chemical processes on the gas parameters. A numerical model was developed for propagation of electro-magnetic waves through the mixture of nitrogen and oxygen in a microwave plasma reactor, in which a discharge occurs due to microwave radiation with a frequency of 2.45 GHz. The model is based on a reduced set of plasma chemical reactions, which includes ionization of atoms and molecules of nitrogen and oxygen, excitation of electronic degrees of freedom, dissociation of molecules, their recombination and other chemical reactions that occur in plasma. Modeling was performed for two pressure values: 150 Torr and 760 Torr. As a result, distribution fields of parameters such as electron density, gas temperature, and heating source power for each mechanism were obtained. Results were analyzed and conclusions were drawn about the influence of pressure and heating mechanisms on plasma parameters.

Keywords: plasma, fluid dynamics, plasma discharge, microwave plasma, CFD, fast gas heating.

3. Введение

СВЧ плазменные реакторы являются перспективной альтернативой другим видам плазменных разрядов, таких как электродные и индуктивно-связанные. Особенностью таких реакторов является простота, компактность и экономичность. СВЧ плазма находит применение в таких областях как системы очистки воздуха и синтез углеродных наноструктур [1].

Моделированию плазменных разрядов различных видов в воздухе посвящено большое количество работ [2][3]. Моделирование СВЧ-разряда уже осуществлялось в различных газах, в том числе и чистом азоте [4].

Численное моделирование СВЧ-разряда в газах – это очень ресурсоёмкий процесс, поэтому для его моделирования применяют упрощённые модели, рассматривающие только определённые параметры плазмы. Например, для построения двумерных моделей разряда химические могут не учитываться, ограничиваясь только рассмотрением изменения плотности электронов [5]. При этом, модели с учётом химических реакций и подробной кинетической схемой чаще всего рассматривают в одномерной постановке [6].

В данной работе было проведено исследование СВЧ разряда в воздухе на основе расширенной гидродинамической модели. Была составлена двухмерная численная модель прохождения смеси газов азота и кислорода через СВЧ плазменный реактор, в котором под действием СВЧ излучения частотой 2.45 ГГц происходит разряд. Модель построена на основе сокращённого набора плазмохимических реакций с учётом механизма быстрого нагрева газа. Был произведён анализ вклада различных механизмов в изменение параметров газа.

4. Теоретическая модель

4.1. Основные уравнения

Для описания СВЧ-разряда необходимо решать плазменные уравнения переноса, совмещённые с уравнениями Максвелла. Запишем сами уравнения Максвелла:

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t},$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t},$$

где \mathbf{E} и \mathbf{H} – это напряжённости электрического и магнитного полей, \mathbf{J} – плотность потока электронов. Делаются следующие предположения [7]:

- Движением ионов по отношению к движению электронов решено пренебречь на временных масштабах СВЧ-излучения.
- Плотность электронов принимается постоянной на временных масштабах СВЧ-излучения.

На основании этих предположений упрощённые уравнения Максвелла записываются в следующем виде:

$$\nabla \times (\mu_r^{-1} \nabla \times \tilde{\mathbf{E}}) - (\omega^2 \varepsilon \varepsilon_r - i\omega\sigma) \tilde{\mathbf{E}} = 0.$$

Решая это уравнение, можно получить выражение для энергии, передаваемой электронам от электромагнитного поля:

$$Q_{rh} = \frac{1}{2} \text{real}(\bar{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{E}^*).$$

Развитие микроволнового плазменного разряда описывается системой расширенных гидродинамических уравнений на основе таких параметров как плотность электронов, средний импульс электронов и их средняя энергия. Скорость изменения плотности электронов описывается следующим выражением:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_e = R_e - (\mathbf{u} \cdot \nabla) n_e,$$

где Γ_e – вектор потока электронов а R_e – их источник или сток. Для этих величин запишутся следующие выражения:

$$\Gamma_e = n_e \mathbf{u}_e = -(\mu_e \cdot \mathbf{E})n_e - \nabla(D_e n_e),$$

где μ_e и D_e – подвижность электронов и их коэффициент диффузии:

$$\mu_e = \frac{q}{m_e \nu_m}, \quad D_e = \frac{k_B T_e}{m_e \nu_m}.$$

Выражения для источников запишутся через коэффициенты скорости реакций, участвующих в изменении плотности электронов:

$$R_e = \sum_j x_j k_j N_n n_e.$$

Выражение для изменения импульса электронов запишется следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial t} (n_e m_e \mathbf{u}_e) + \nabla \cdot n_e m_e \mathbf{u}_e \mathbf{u}_e^T = -(\nabla \cdot \mathbf{p}_e) + q n_e \mathbf{E} - n_e m_e \mathbf{u}_e \nu_m,$$

где m_e – масса электронов, \mathbf{u}_e – дрейфовая скорость электронов, \mathbf{p}_e – тензор давлений электронов, q – заряд электрона, ν_m – частота обмена импульсом. Для Максвелловского распределения тензор давлений можно записать следующим образом, используя уравнение состояния:

$$\mathbf{p}_e = n_e k_B T_e \mathbf{I}.$$

Исходя из этих предположений, можно вывести выражение для дрейфовой скорости:

$$\mathbf{u}_e = -\frac{k_B}{m_e \nu_m} \nabla T_e - \frac{k_B T_e}{n_e m_e \nu_m} \nabla n_e + \frac{q}{m_e \nu_m} \mathbf{E}.$$

Выражение для плотности энергии электронов запишется следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial t} (n_\varepsilon) + \nabla \cdot \Gamma_\varepsilon + \mathbf{E} \cdot \Gamma_e = S_{en} - (\mathbf{u} \cdot \nabla) n_\varepsilon + \frac{Q}{q},$$

где Γ_ε – плотность потока энергий, S_{en} – потеря или получение энергии за счёт неупругих соударений, Q – внешние источники энергии (например от электромагнитного поля), μ_ε – подвижность энергий электронов,

$$\Gamma_\varepsilon = -(\mu_\varepsilon \cdot \mathbf{E})n_\varepsilon - \nabla(\mathbf{D}_\varepsilon n_\varepsilon).$$

Члены потери энергий получают путём суммирования потери энергии по всем реакциям:

$$S_{en} = \sum_j x_j k_j N_n n_e \Delta \varepsilon_j.$$

Для реакций с участием электронов коэффициенты скорости реакций вычисляются на основе функции распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ) и данных о поперечных сечениях. В данной работе используется Максвелловское распределение:

$$k_k = \gamma \int_0^\infty \varepsilon \sigma_k(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon,$$

где σ_k – поперечное сечение столкновения, f – функция распределения.

Для многокомпонентной смеси уравнения изменения массовых долей каждой из компонент запишутся следующим образом:

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} (w_k) + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) w_k = \nabla \cdot \mathbf{j}_k + R_k,$$

где \mathbf{j}_k – вектор диффузионного потока, R_k – уравнение реакции для k -ой компоненты, w_k – массовая доля k -ой компоненты.

$$R_k = M_k \sum_j v_{kj} r_j,$$

где v_{kj} – стехиометрическая матрица, r_j – скорость j -ой реакции.

Для учёта нагрева газа решается уравнение теплового баланса:

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T \right) + \nabla \cdot \mathbf{q} = \alpha_p T \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla p \right) + \tau: \nabla \mathbf{u} + Q,$$

где C_p – теплоёмкость, α_p – коэффициент термического расширения, Q – тепловой источник за счёт упругих соударений электронов с двухатомными азотом и кислородом, а также за счёт механизма быстрого нагрева.

4.2. Граничные условия

На стенках трубки обмен электронами происходит за счёт следующих механизмов:

- Потеря электронов за счёт суммарного потока электронов из плазмы в стенку.
- Потеря электронов в результате случайного движения в пределах длины свободного пробега у стенки.
- Приобретение электронов за счёт вторичной эмиссии.
- Получение электронов за счёт термоионной эмиссии.

Исходя из этого, для потока электронов и потока энергии запишутся следующие выражения на стенке:

$$\mathbf{n} \cdot \Gamma_e = \frac{1 - r_e}{1 + r_e} \left(\frac{1}{2} v_{e,th} n_e \right) - \left(\sum_i \gamma_i (\Gamma_i \cdot \mathbf{n}) + \Gamma_t \cdot \mathbf{n} \right),$$

$$\mathbf{n} \cdot \Gamma_\varepsilon = \frac{1 - r_e}{1 + r_e} \left(\frac{5}{6} v_{e,th} n_\varepsilon \right) - \left(\sum_i \gamma_i \bar{\varepsilon}_i (\Gamma_i \cdot \mathbf{n}) + \bar{\varepsilon}_t \Gamma_t \cdot \mathbf{n} \right).$$

Для тяжёлых компонент на стенках задаются реакции, при которых нестабильные соединения распадаются на более стабильные, а ионы и возбуждённые частицы возвращаются в нейтральные состояния. Для этих реакций константа скорости запишется следующим образом:

$$k_i = \left(\frac{\gamma_i}{1 - \gamma_i/2} \right) \frac{\prod \sigma_j^{v_{ji}}}{(\Gamma_{tot})^m} \left(\frac{1}{4} \right) \sqrt{\frac{8RT}{\pi M_k}},$$

где γ_i – коэффициент прилипания, который может принимать значения 0 или 1.

4.3. Геометрия

Двумерная геометрическая модель плазменного реактора представлена на рисунке 1.

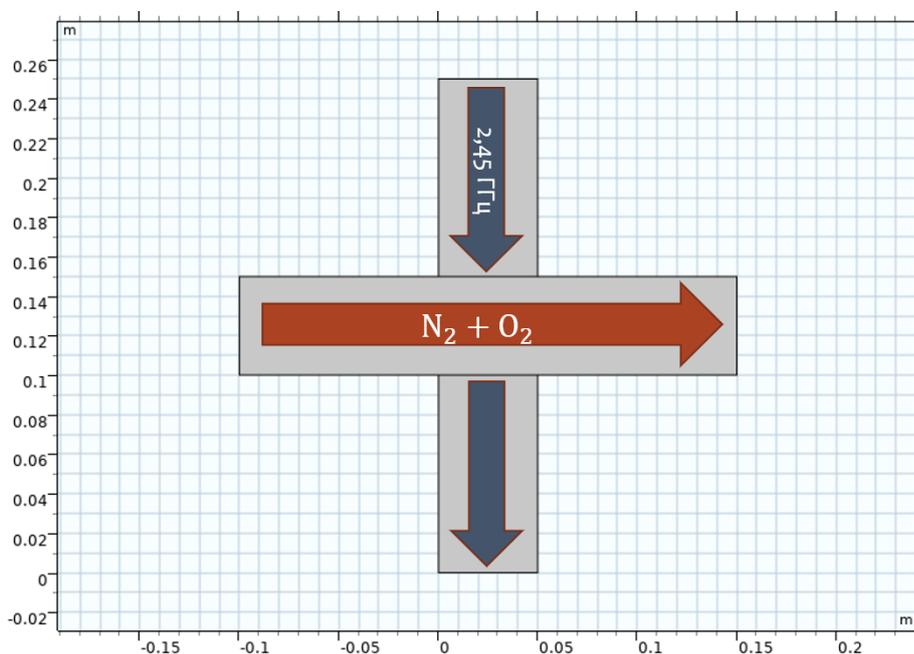


Рис. 1. Геометрическая модель плазменного реактора

Горизонтальный элемент представляет собой трубку, по которой будет проходить смесь газов азота и воздуха в массовом соотношении 76,85:23,15. Из-за малого процентного соотношения примесями было решено пренебречь. Вертикальный элемент представляет собой волновод, по которому будет проходить электромагнитное излучение с частотой 2,45 ГГц. В результате взаимодействия этих двух потоков в месте пересечения образуется плазма.

4.4. Плазмохимия

Плазмохимический процесс в воздухе состоит из большого количества реакций (их число составляет 445) в которых участвует 46 химических компонент (включая электрон) [8]. Их можно разделить на следующие группы, это:

- Неупругие взаимодействия с электронами (возбуждение, ионизация и диссоциация);
- Ассоциативная ионизация;

- Рекомбинация положительных ионов с электронами;
- Прилипание и отлипание электронов;
- «Тушение» возбуждённых частиц;
- Конверсия ионов;
- Рекомбинация между положительными и отрицательными ионами;
- Другие реакции между нейтральными компонентами.

В данной работе используется сокращённый набор на основе [2], состоящий из 55 реакций, в которых участвуют 20 компонент (включая электрон). Список реакций и их коэффициенты скорости представлены в таблице 1.

Реакции с участием электронов взяты из [9]. The Plasma Data Exchange Project – проект по сбору наиболее востребованных данных о различных плазмохимических процессах. Для данной работы будут использованы данные поперечных сечений взаимодействия электронов с атомами и молекулами азота и кислорода в их нейтральном, возбуждённом и ионизированном состояниях.

Уравнения с участием тяжёлых компонент и их коэффициенты скорости были взяты из следующих статей [8][10].

Нагрев газа реализуется за счёт передачи энергии при упругом столкновении электронов с двухатомными азотом и кислородом, а также за счёт реализации механизма быстрого нагрева газа [11].

Для учёта электронного нагрева используются следующие реакции:

1. $N_2 + e \rightarrow N_2 + e$
2. $O_2 + e \rightarrow O_2 + e$

В работах по исследованию нагрева газа в воздухе было показано, что в мощных электрических полях основной вклад в быстрый нагрев вносят реакция диссоциации молекулы N_2 , а также реакции с участием заряжённых

частиц. Поэтому для реализации быстрого нагрева были выбраны следующие реакции [4]:

1. $N_2 + e \rightarrow N + N + e$
2. $N_2(A) + N_2(A) \rightarrow N_2(C) + N_2$
3. $N_2(A) + N_2(A) \rightarrow N_2(B) + N_2$
4. $N_2^+ + e \rightarrow N + N$

Таблица 1. Список реакций, моделируемых в работе.

№	Реакция	Константа скорости (1/с, см ³ /с, см ⁶ /с)	Источник
1	$e + N_2 \rightarrow e + N_2$	Расчёт из ФРЭЭ*	[9]
2	$e + N_2 \rightarrow e + N_2(A)$	Расчёт из ФРЭЭ	[9]
3	$e + N_2 \rightarrow e + N_2(B)$	Расчёт из ФРЭЭ	[9]
4	$e + N_2 \rightarrow e + N_2(a)$	Расчёт из ФРЭЭ	[9]
5	$e + N_2 \rightarrow e + N_2(C)$	Расчёт из ФРЭЭ	[9]
6	$e + N_2 \rightarrow e + e + N_2^+$	Расчёт из ФРЭЭ	[9]
7	$e + N_2^+ \rightarrow N + N$	$1.8 * 10^{-13} * (300/T_e)^{0.15}$	[8][10]
8	$e + O_2 \rightarrow e + O_2$	Расчёт из ФРЭЭ	[9]
9	$e + 2O_2 \rightarrow O_2 + O_2^-$	Расчёт из ФРЭЭ	[9]
10	$e + O_2 \rightarrow e + e + O_2^+$	Расчёт из ФРЭЭ	[9]
11	$e + O_2 \rightarrow O + O + e$	Расчёт из ФРЭЭ	[9]
12	$e + O_2 \rightarrow O^- + O$	Расчёт из ФРЭЭ	[9]
13	$e + O_2^+ \rightarrow O + O$	$2.97 * 10^{-9} * T_e^{-0.7}$	[8][10]
14	$e + O \rightarrow O(^1D) + e$	Расчёт из ФРЭЭ	[8][10]
15	$O + O_2^- \rightarrow O_3 + e$	$1.5 * 10^{-10}$	[8][10]
16	$O + O^- \rightarrow O_2 + e$	$5 * 10^{-10}$	[8][10]
17	$O + O_3^- \rightarrow 2O_2 + e$	$1.4 * 10^{-10}$	[8][10]

18	$N_2 + O_2^- \rightarrow O_2 + N_2 + e$	$1.9 * 10^{-12} * (T/300)^{0.5} * \exp(-4990/T)$	[8][10]
19	$O_2 + O_2^- \rightarrow 2O_2 + e$	$2 * 10^{-10}$	[8][10]
20	$O + O_3 \rightarrow 2O_2$	$2 * 10^{-11} * \exp(-2300/T)$	[8][10]
21	$O + 2O_2 \rightarrow O_3 + O_2$	$7.6 * 10^{-34} * (T/300)^{-1.9}$	[8][10]
22	$O + O_2 + N_2 \rightarrow O_3 + N_2$	$5.8 * 10^{-34} * (T/300)^{-2.8}$	[8][10]
23	$O + O_2 + O_3 \rightarrow 2O_3$	$1.5 * 10^{-34} * \exp(750/T)$	[8][10]
24	$2O + O_2 \rightarrow O_3 + O$	$2.15 * 10^{-34} * \exp(345/T)$	[8][10]
25	$N_2(A) + O_2 \rightarrow N_2 + 2O$	$2.54 * 10^{-12}$	[8][10]
26	$N_2(A) + O_2 \rightarrow N_2O + O$	$7.8 * 10^{-12}$	[8][10]
27	$N_2(A) + O_2 \rightarrow N_2 + O_2$	$1.29 * 10^{-12}$	[8][10]
28	$N_2(B) + N_2 \rightarrow N_2(A) + N_2$	$3 * 10^{-11}$	[8][10]
29	$N_2(B) + O_2 \rightarrow N_2 + 2O$	$3 * 10^{-10}$	[8][10]
30	$N_2(A) + N_2(A) \rightarrow N_2(C) + N_2$	$1.6 * 10^{-16}$	[8][10]
31	$N_2(A) + N_2(A) \rightarrow N_2(B) + N_2$	$3 * 10^{-16}$	[8][10]
32	$N_2(a) + N_2 \rightarrow N_2(B) + N_2$	$2 * 10^{-13}$	[8][10]
33	$N_2(a) + O_2 \rightarrow N_2 + 2O$	$2.8 * 10^{-11}$	[8][10]
34	$N_2(C) \rightarrow N_2(B)$	$3 * 10^7$	[8][10]
35	$N_2(C) + N_2 \rightarrow N_2(a) + N_2$	$1 * 10^{-11}$	[8][10]
36	$N_2(C) + O_2 \rightarrow N_2 + 2O$	$3 * 10^{-10}$	[8][10]
37	$O(^1D) + N_2 \rightarrow O + N_2$	$1.8 * 10^{-11} * \exp(107/T)$	[8][10]
38	$O(^1D) + O_2 \rightarrow O + O_2$	$6.4 * 10^{-12} * \exp(67/T)$	[8][10]
39	$2N_2 + O_2^+ \rightarrow N_2 + N_2O_2^+$	$9 * 10^{-31} * (T/300)^{-2}$	[8][10]
40	$N_2 + N_2O_2^+ \rightarrow 2N_2 + O_2^+$	$1.1 * 10^{-6} * (300/T)^{5.3} * \exp(-2357/T)$	[8][10]
41	$2O_2 + O_2^- \rightarrow O_2 + O_4^-$	$3.5 * 10^{-31} * (300/T)$	[8][10]
42	$O_2 + N_2 + O_2^- \rightarrow N_2 + O_4^-$	$3.5 * 10^{-31} * (300/T)$	[8][10]

43	$O + O_2^- \rightarrow O_2 + O^-$	$3.3 * 10^{-10}$	[8][10]
44	$O + O_3^- \rightarrow O_2 + O_2^-$	$3.2 * 10^{-19}$	[8][10]
45	$O_2 + N_2 + O^- \rightarrow N_2 + O_3^-$	$1.1 * 10^{-30} * (300/T)$	[8][10]
46	$2O_2 + O^- \rightarrow O_2 + O_3^-$	$1.1 * 10^{-30} * (300/T)$	[8][10]
47	$N_2 + O_4^- \rightarrow O_2 + N_2 + O_2^-$	$1 * 10^{-9} * \exp(-1044/T)$	[8][10]
48	$O_2 + O_4^- \rightarrow O_2 + O_2 + O_2^-$	$1 * 10^{-9}$	[8][10]
49	$O_2^- + O_2^+ \rightarrow 2O_2$	$2 * 10^{-7} * (300/T)^{0.5}$	[8][10]
50	$O^- + O_2^+ \rightarrow O + O_2$	$2 * 10^{-7} * (300/T)^{0.5}$	[8][10]
51	$O_3^- + O_2^+ \rightarrow O_3 + O_2$	$2 * 10^{-7} * (300/T)^{0.5}$	[8][10]
52	$O_2^- + O_2^+ \rightarrow O_2 + 2O$	10^{-7}	[8][10]
53	$O_3^- + O_2^+ \rightarrow O_3 + 2O$	10^{-7}	[8][10]
54	$O_2 + O_2^- + O_2^+ \rightarrow 3O_2$	$2 * 10^{-25} * (300/T)^{2.5}$	[8][10]
55	$N_2 + O_2^- + O_2^+ \rightarrow 2O_2 + N_2$	$2 * 10^{-25} * (300/T)^{2.5}$	[8][10]

*ФРЭЭ – функция распределения электронов по энергии.

5. Результаты

Была собрана модель на основе сокращённого набора, состоящего из 55 реакций и 20 компонент, включая электрон. Будут рассматриваться два случая: при давлении 150 Торр и нагреве только за счёт упругих соударений и при атмосферном давлении с учётом механизма быстрого нагрева газа. В момент времени $t = 0$ с электроны начинают движение под действием электрического поля, создаваемого магнетроном. После этого происходит формирование плазмоида вследствие взаимодействия электронов с атомами и молекулами газа (возбуждение, ионизация). Рассмотрим подробнее полученные результаты.

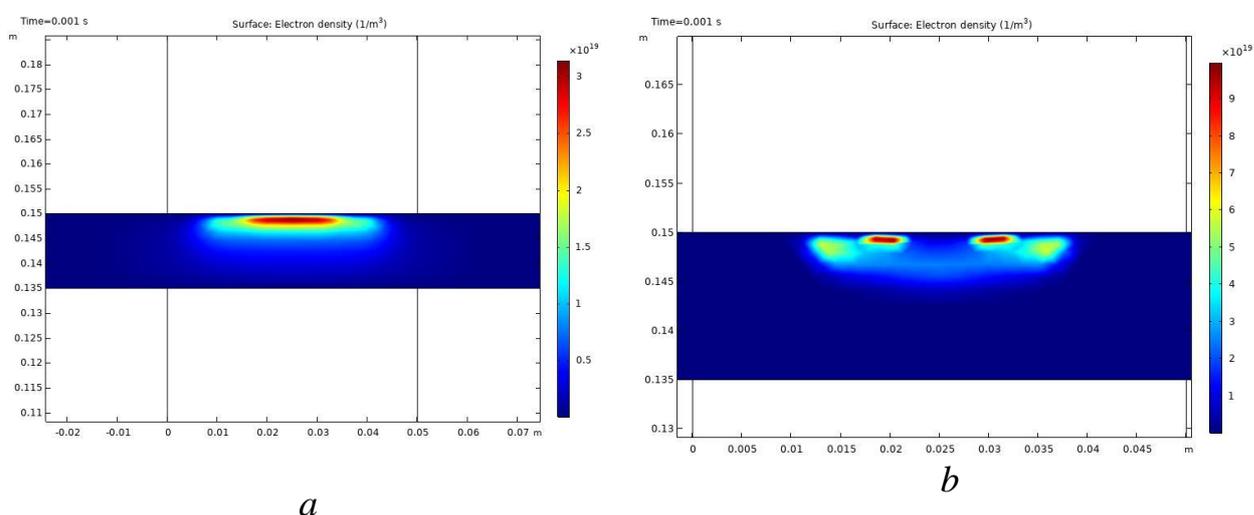


Рис. 2. Распределение плотности электронов – давление 150 Торр *a*), давлении 760 Торр *b*)

На рисунке 2 приведены распределения концентрации электронов момент времени $t = 0.001$ с. В обоих случаях плазмоид образуется в верхней части трубки, однако в случае атмосферного давления он разделяется на две части, расходясь в противоположные стороны. При высоком давлении максимальная концентрация электронов составляет $\sim 9 \times 10^{19}$. Разницу в площади плазмоида можно объяснить тем, что в случае низкого давления длина свободного пробега в газе выше, и СВЧ-излучение может глубже пройти в среду, в то время как при атмосферном давлении излучение

преграждается областью с плотностью электронов, превышающей критическую.

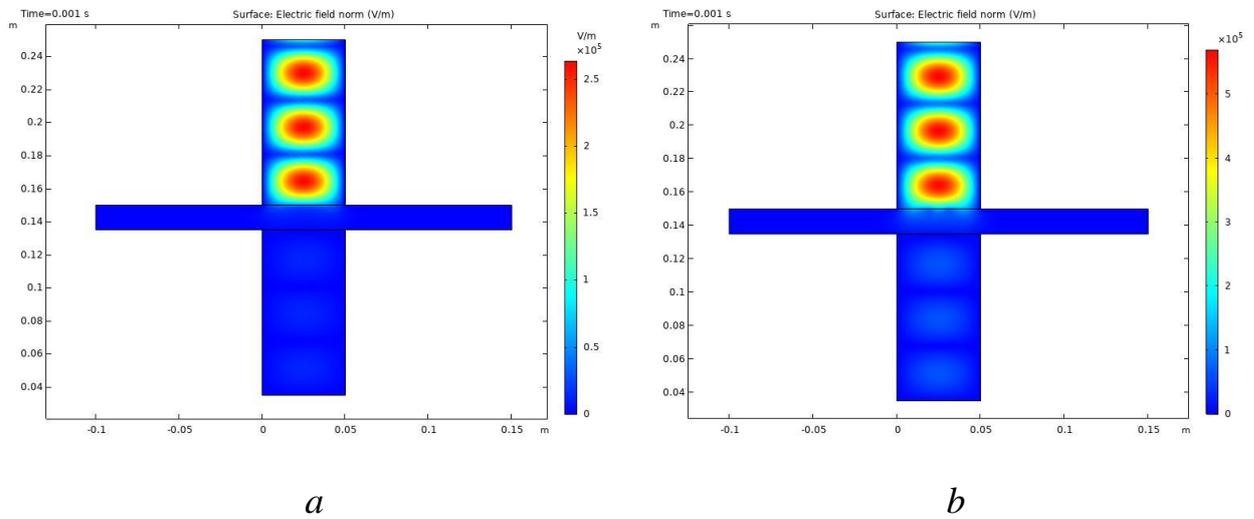


Рис. 3. Распределение напряжённости электрического поля – давление 150 Торр *a*), давление 760 Торр *b*)

На рисунке 3 показаны распределения напряжённости электрического поля в момент времени $t = 0.001$ с. Напряжённость электрического поля в обоих случаях резко падает, проходя через область с газом.

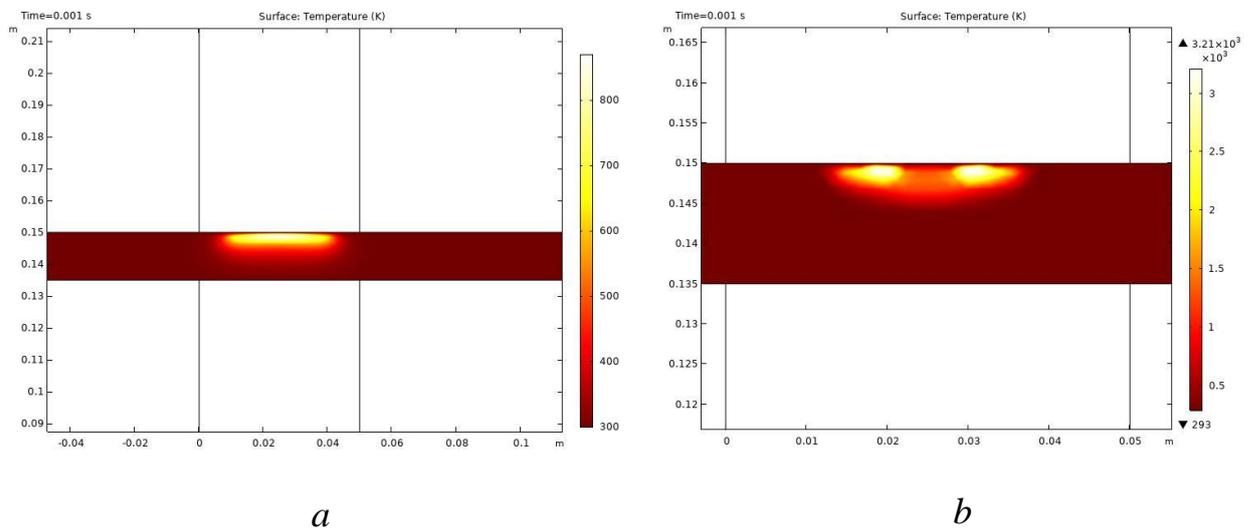
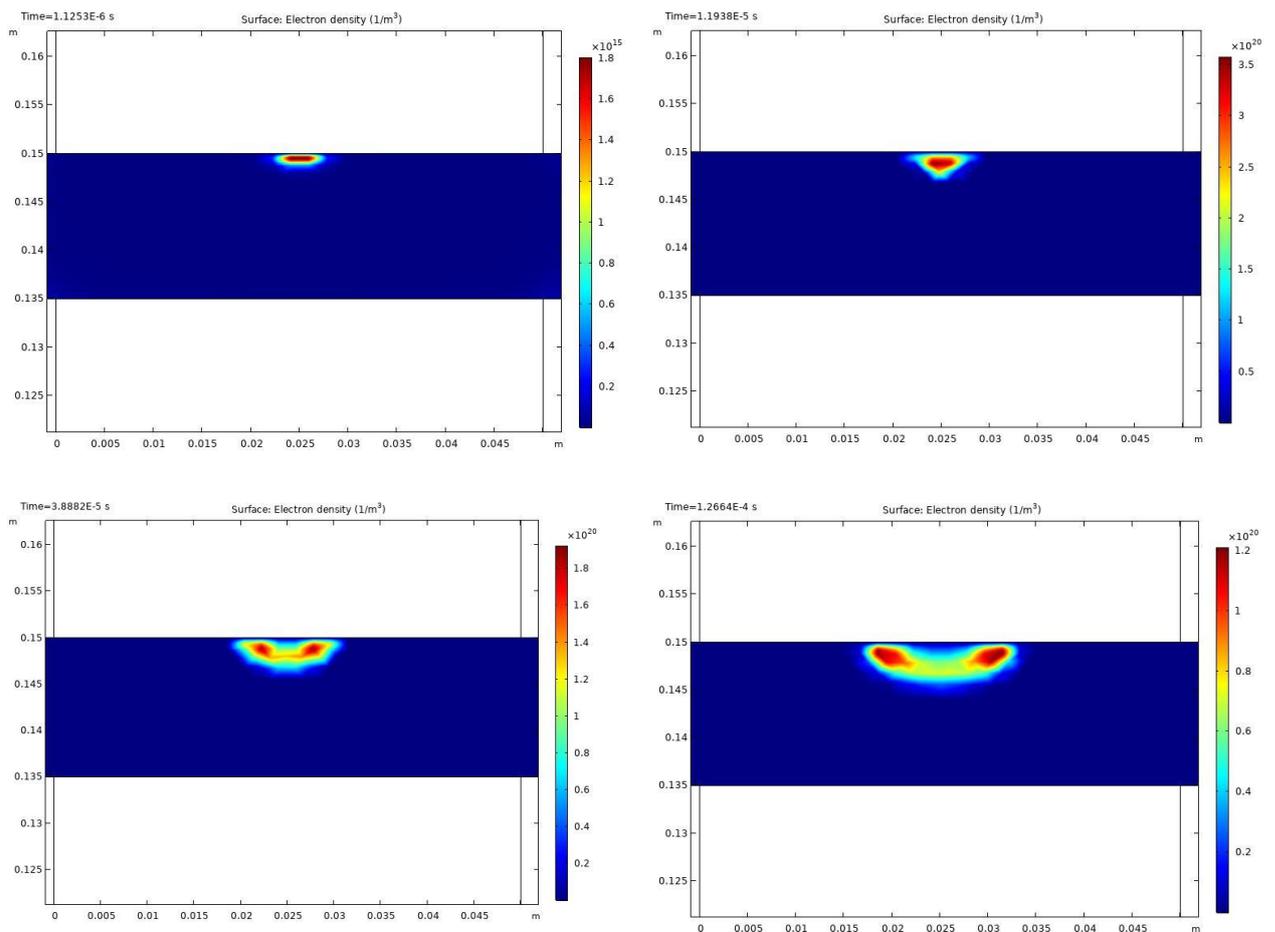


Рис. 4. Распределение температуры газа – давление 150 Торр *a*), давление 760 Торр *b*)

На рисунке 4 показаны распределения температуры газа в момент времени $t = 0.001$ с. В момент времени $t = 0$ с температура газа была 300K.

В случае низкого давления газ прогревается в большей площади по сравнению со случаем высокого давления. Однако, если при низком давлении максимальная температура газа составляла $\sim 850^{\circ}\text{K}$ то при атмосферном давлении она доходит до $\sim 3210^{\circ}\text{K}$. Такую разницу в нагреве можно объяснить большей концентрацией молекул азота, из-за чего частота соударений с электронами становится выше, что приводит к большему локальному нагреву. В экспериментальных работах было показано, что температура газа в сформировавшемся СВЧ-разряде находится в пределах $3000 - 4000^{\circ}\text{K}$ [6], однако, чтобы можно было опираться на эти данные нужно учесть движение газа в трубке.

Далее рассмотрим, как меняются параметры плазмы с течением времени в случае атмосферного давления.



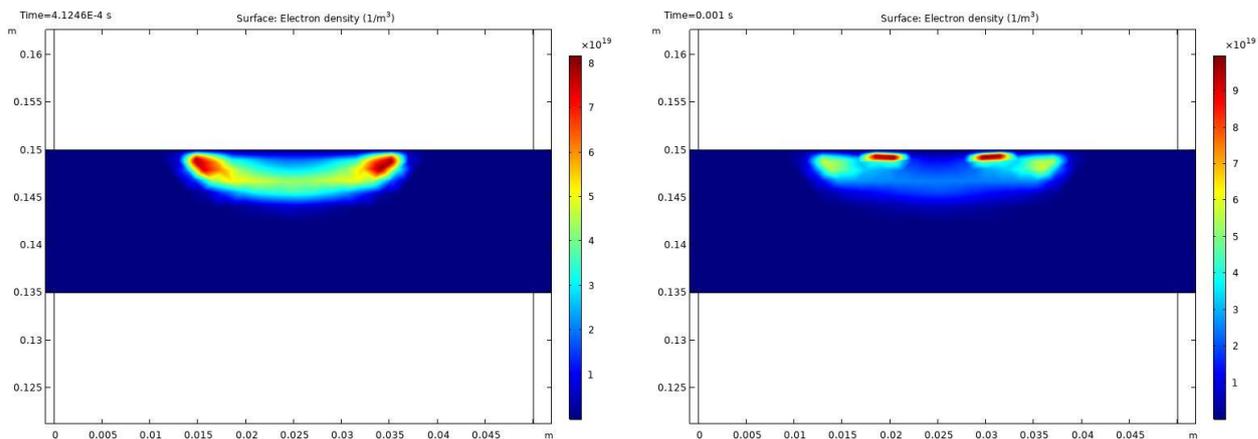
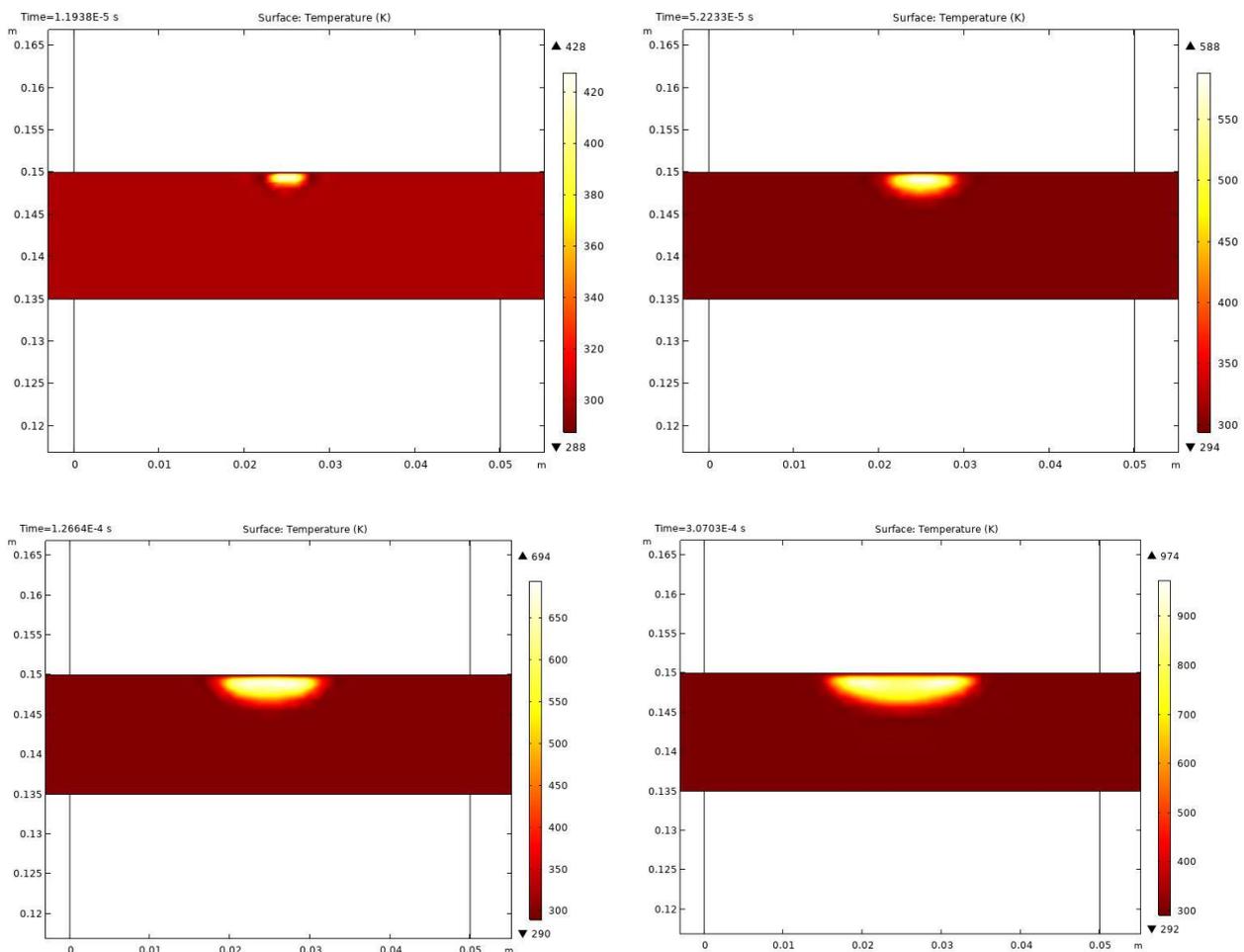


Рис. 5. Изменение распределения плотности электронов с течением времени

На рисунке 5 показано изменение распределения плотности электронов с течением времени. С течением времени плазмоид разделяется, расходясь в разные стороны параллельно оси трубки. При этом, как только его противоположные концы разойдутся на расстояние, сопоставимое с размером волноводной системы, в центре образуются новые максимумы.



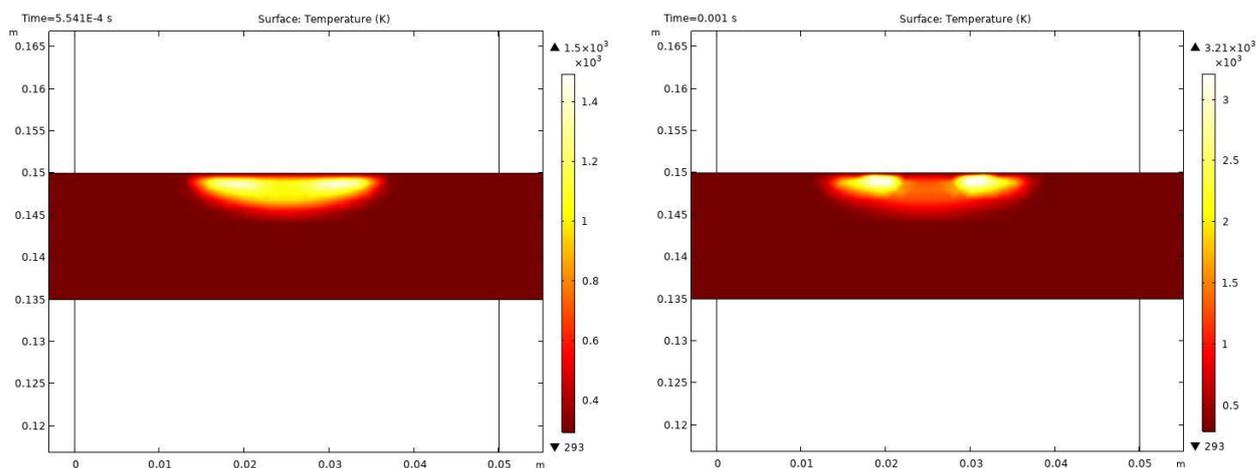


Рис. 6. Изменение распределения температуры газа с течением времени

На рисунке 6 показано изменение распределения температуры газа с течением времени. Область нагрева постепенно расширяется вдоль трубки, повторяя движение плазмоида. При этом наиболее горячие точки соответствуют максимумам плотности электронов.

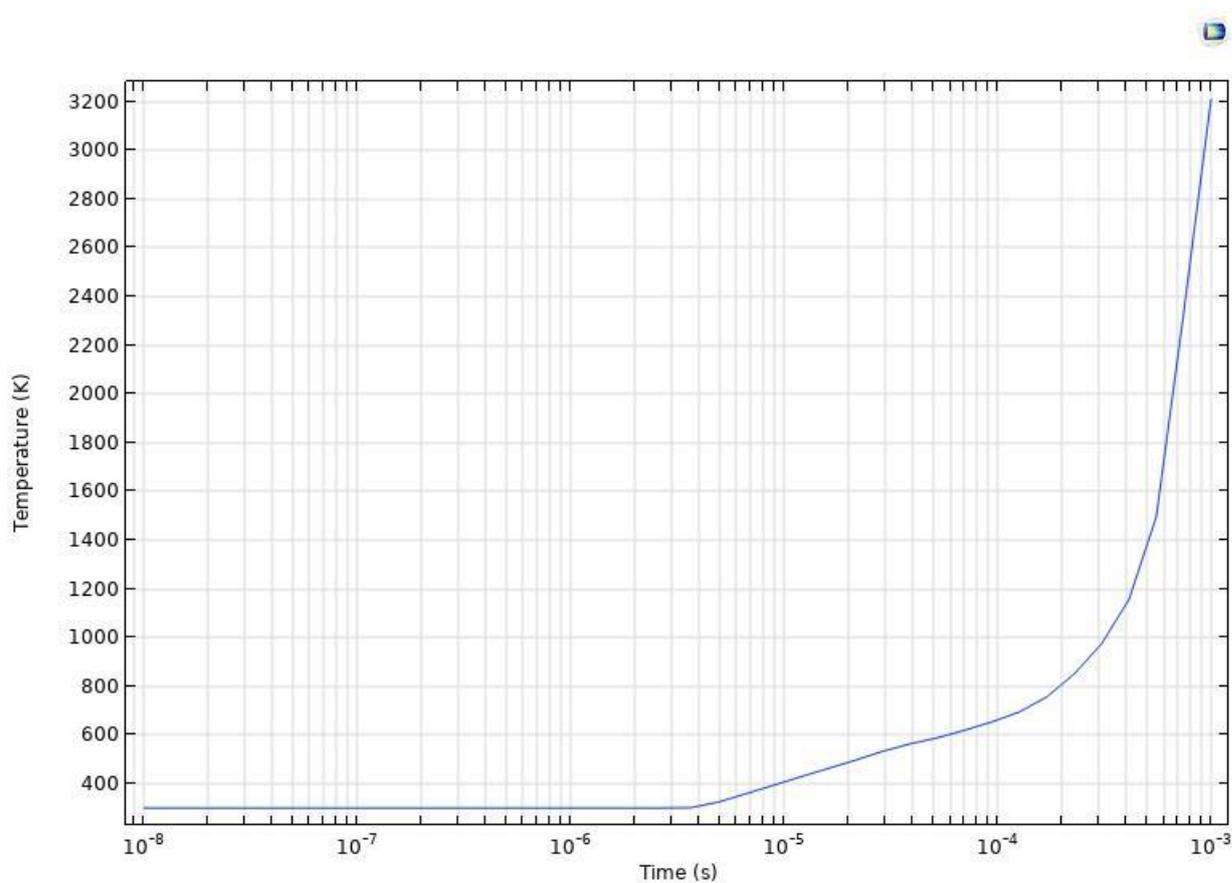


Рис. 7. Изменение максимальной температуры газа с течением времени

На рисунке 7 показано изменение максимальной температуры газа с течением времени. В период с 10^{-6} с до 10^{-4} с максимальная температура газа медленно возрастает, однако с $\sim 10^{-4}$ до 10^{-3} происходит резкое возрастание максимальной температуры газа. Если посмотреть на распределения плотности электронов, плотности молекул N_2 и температуры, то можно заметить, что максимальная температура достигается в максимумах плотности электронов и концентрации молекул, из чего можно сделать вывод о высоком локальном вкладе обоих механизмов нагрева.

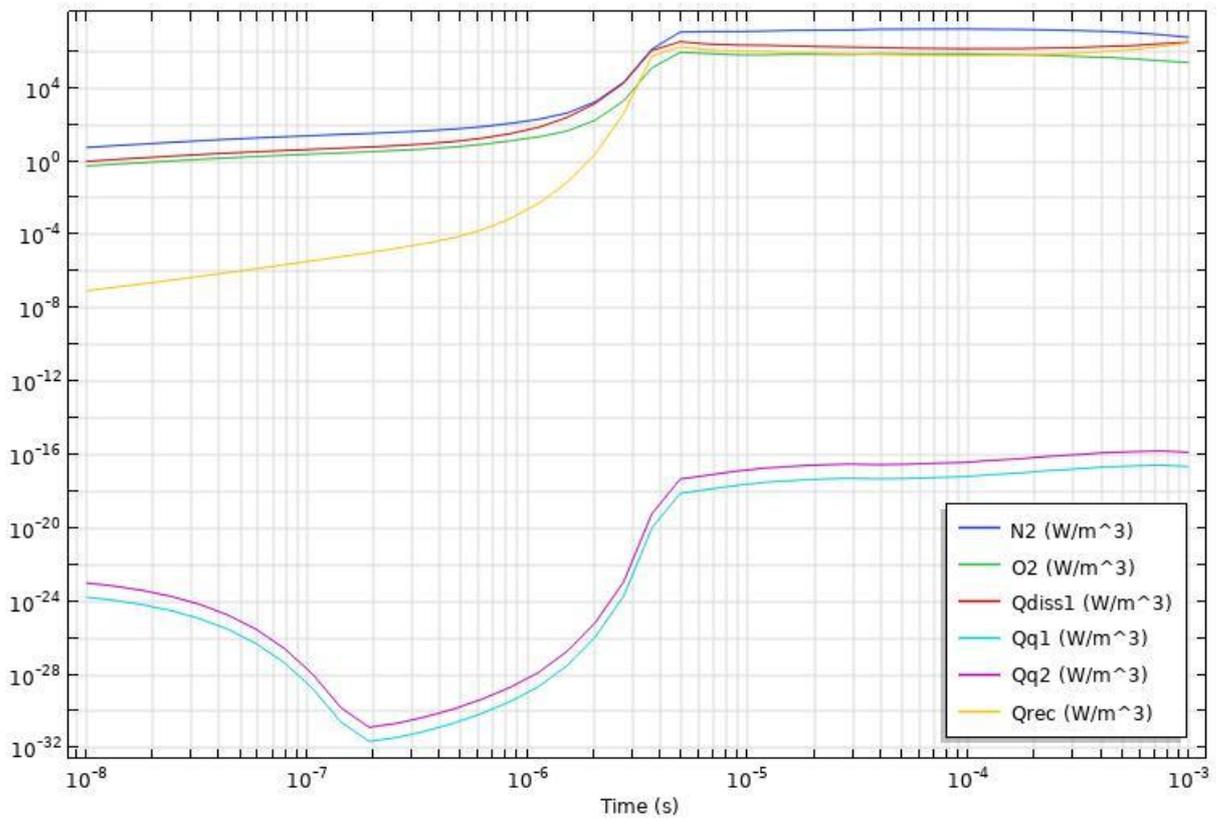


Рис. 8. Вклад реакций механизмов нагрева газа с течением времени

На рисунке 8 показаны осреднённые мощности, создаваемые различными реакциями механизма нагрева газа с течением времени. Реакции N_2 и O_2 – это реакции механизма электронного нагрева с азотом и кислородом соответственно. Q_{diss1} , Q_{q1} , Q_{q2} , Q_{rec} – это реакции механизма быстрого нагрева.

Наибольший вклад в нагрев газа оказывают соударения электронов с двухатомными молекулами азота (N_2). Второй по величине вклад оказывает диссоциация молекулы азота (Q_{diss1}), третий – соударение электронов с молекулами кислорода (O_2). Четвёртая реакция из механизма быстрого нагрева (Q_{rec}) сначала не оказывает особого влияния, но с увеличением числа ионов её вклад в нагрев становится сопоставим с другими процессами. Реакции изменения электронных состояний молекул азота (Q_{q1}, Q_{q2}) вносят незначительный вклад в нагрев.

Теперь рассмотрим результирующие концентрации тяжёлых частиц.

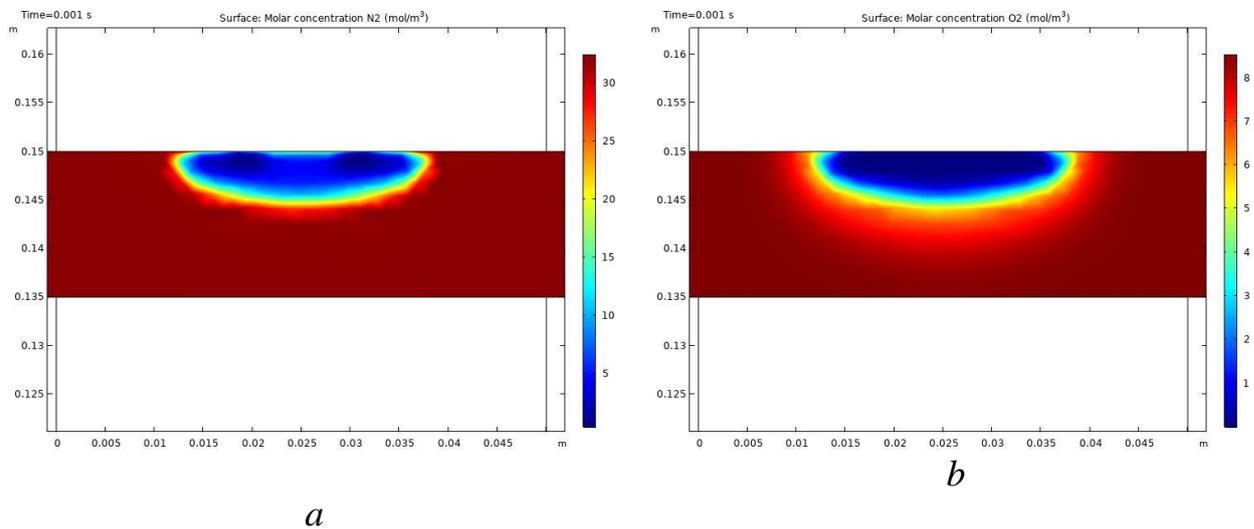


Рис. 9. Распределение концентраций – N_2 a), O_2 b)

На рисунке 9 показаны концентрации для молекул N_2 и O_2 . В области разряда наблюдается резкое падение концентраций молекулярных азота и кислорода. Особенно сильный провал для азота наблюдается в точках, соответствующих максимумам концентрации электронов.

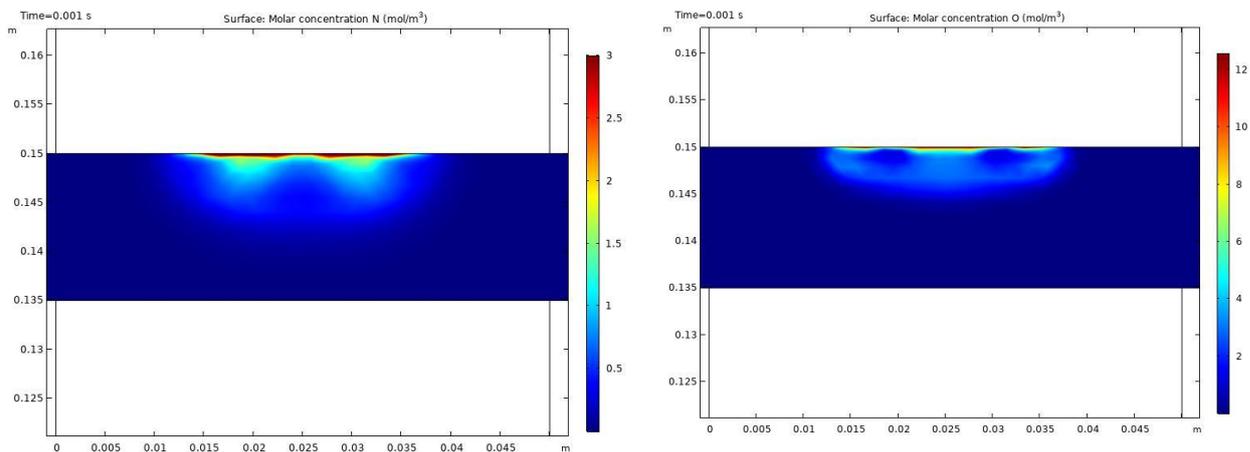


Рис. 10. Распределение концентраций – N a), O b)

На рисунке 10 показаны концентрации для атомов N и O . В этой же области происходит возрастание концентраций атомарных азота и кислорода.

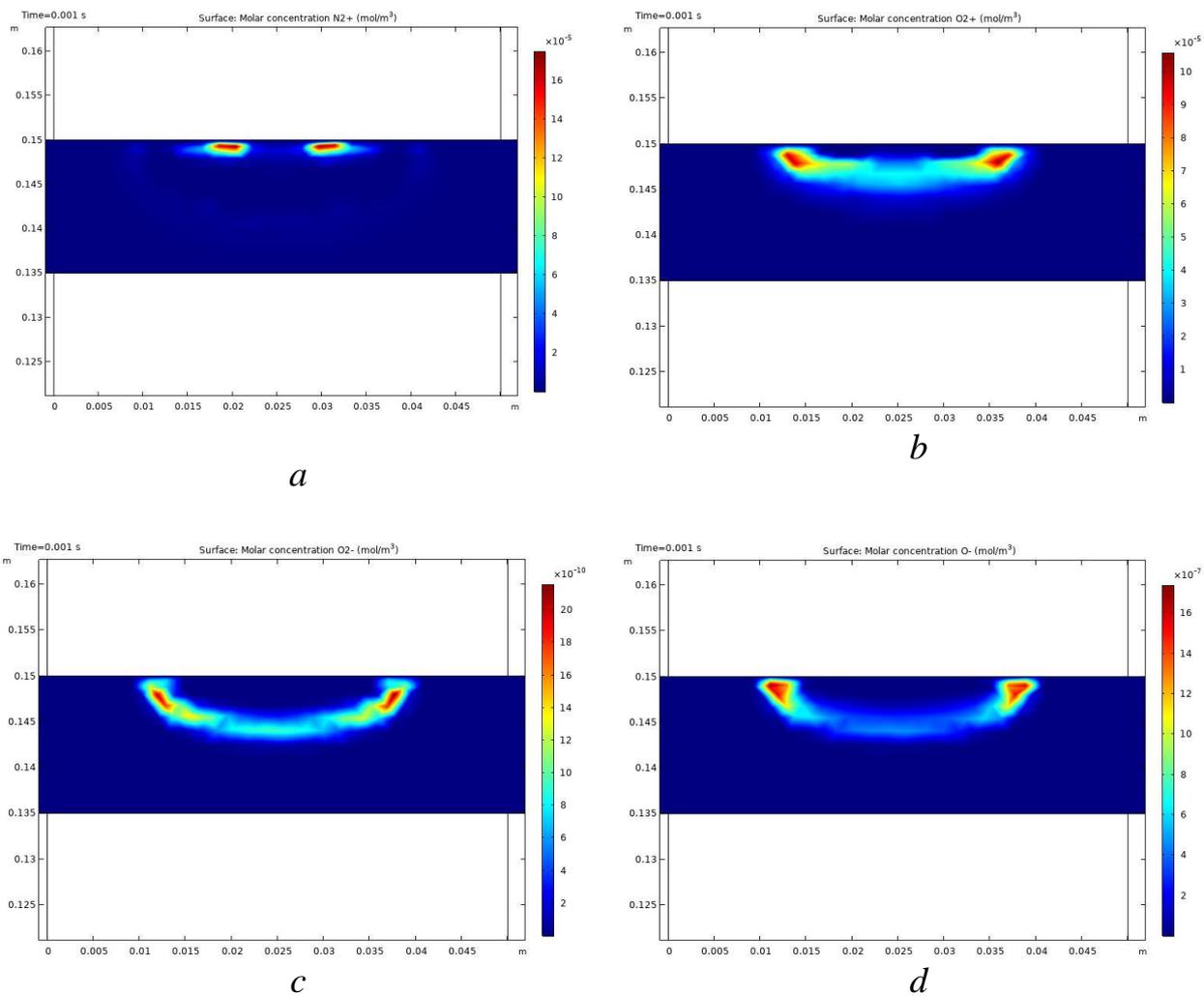


Рис. 11. Распределение концентраций ионов – N_2^+ a), O_2^+ b), O_2^- c), O^- d)

На рисунке 11 показано распределение концентраций ионов. Распределение концентраций как положительных, так и отрицательных ионов азота и кислорода повторяют движение плазмоида. При этом, максимальная концентрация ионов молекулы азота достигается в зарождающихся очагах максимумов электронов, когда для ионов кислорода такое поведение не наблюдается.

6. Заключение

Были собраны основные данные, описывающие микроволновый плазменный разряд в воздухе. На основе этих данных была собрана модель в пакете программ COMSOL Multiphysics. Проводился расчёт при двух давлениях: 150 Торр и 760 Торр. Были получены распределения температуры, напряжённости электрического поля, а также концентраций электронов и тяжёлых частиц. Было наглядно продемонстрировано развитие плазменного разряда с течением времени. В результате моделирования было установлено, что реакции диссоциации молекул азота и упругих соударений электронов с молекулами газа вносят существенный вклад в общий нагрев газа, при этом реакции с изменением электронных состояний молекулы азота из моделирования нагрева можно исключить.

Полученная модель имеет ряд ограничений. Для молекул газа учитываются только поступательные и электронные степени свободы, при этом нет учёта колебательных, что особенно важно для азота. Также в этой модели газ в трубке покоится, что затрудняет сравнение теоретических результатов с экспериментальными, полученными на промышленном оборудовании ввиду того, что там газ постоянно находится в движении.

7. Список использованной литературы

1. Uhm, H.s & Hong, Yun-Chul & Shin, D.H.. (2006). A microwave plasma torch and its applications. *Plasma Sources Science and Technology*. 15. S26. 10.1088/0963-0252/15/2/S04.
2. M. S. Bak and M. A. Cappelli, "A Reduced Set of Air Plasma Reactions for Nanosecond Pulsed Plasmas," in *IEEE Transactions on Plasma Science*, vol. 43, no. 4, pp. 995-1001, April 2015, doi: 10.1109/TPS.2015.2409300.
3. Riccardi, Claudia & Barni, Ruggero. (2012). Chemical Kinetics in Air Plasmas at Atmospheric Pressure. 10.5772/38396.
4. Saifutdinov and E. V. Kustova , "Dynamics of plasma formation and gas heating in a focused-microwave discharge in nitrogen", *Journal of Applied Physics* 129, 023301 (2021) <https://doi.org/10.1063/5.0031020>
5. Kourtzanidis, Konstantinos & Boeuf, jean-pierre & Rogier, François. (2014). Three dimensional simulations of pattern formation during high-pressure, freely localized microwave breakdown in air. *Physics of Plasmas*. 21, 123513 (2014);. 10.1063/1.4905071.
6. Tatarova, Elena & Dias, F. & Felizardo, Edgar & Henriques, Júlio & Pinheiro, Mario & Ferreira, C. & Gordiets, B.. (2010). Microwave air plasma source at atmospheric pressure: Experiment and theory. *Journal of Applied Physics - J APPL PHYS*. 108. 3305-123305. 10.1063/1.3525245.
7. Hagelaar, G. & Makasheva, Kremena & Garrigues, Laurent & Boeuf, jean-pierre. (2009). Modeling of a Dipolar Microwave Plasma Sustained by Electron Cyclotron Resonance. *Journal of Physics D-applied Physics - J PHYS-D-APPL PHYS*. 42. 10.1088/0022-3727/42/19/194019.
8. Kossyi, I.A. & Kostinskiy, Alexander & Matveev, A.A.. (1992). Kinetic scheme of the non-equilibrium nitrogen-oxygen mixtures. *Plasma Sources Science and Technology*. 1. 207-220.
9. <http://www.lxcat.net>

10. Gordillo-Vázquez, F. (2008). Air plasma kinetics under the influence of sprites. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 41. 234016. 10.1088/0022-3727/41/23/234016.
11. Popov, Nikolay. (2011). Fast gas heating in a nitrogen–oxygen discharge plasma: I. Kinetic mechanism. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 44. 285201. 10.1088/0022-3727/44/28/285201.