

初始温度对 O₂ 等离子体形成过程的影响

王 峰, 何立明, 兰宇丹, 杜宏亮

(空军工程大学 工程学院, 陕西 西安 710038)

摘 要:在 O₂ 等离子体物理化学模型的基础上, 对不同初始温度下 O₂ 等离子体中的主要粒子的形成过程进行了数值模拟, 跟踪各种主要成分粒子浓度随时间的变化, 得到了初始温度对等离子体主要带电粒子和中性粒子浓度的影响规律。计算结果表明: 随着初始温度的升高, O₂ 等离子体中各种主要成分粒子浓度的变化规律相似, 粒子浓度变化趋势受初始温度影响不明显。e、O、O₂、O⁺ 随时间增长浓度变化比较大, O⁻、O₂⁻、O₂⁺、O^{*}、O₂^{*} 等随时间增长浓度变化相对较小, 但最终都达到一定的平衡状态。

关键词:等离子体; 粒子浓度; 初始温度; 化学反应; 数值模拟

DOI:10.3969/j.issn.1009-3516.2010.02.005

中图分类号: V231.2 **文献标识码:** A **文章编号:** 1009-3516(2010)02-0021-03

O₂ 等离子体产生以后, 等离子体各成分之间会发生复杂的激发、电离、复合、分解、电荷交换等物理反应和氧化、复合、还原等化学反应, 还可能产生各种分子团簇^[1-2], 这样的物理化学反应使气体的形成过程和成分更为复杂。目前, 国内外对不同条件下 O₂ 等离子体变化过程开展了大量研究^[3-4]。20 世纪 30 年代, Lovell 和 Campbell 对 O₂ 分子结构和内部碰撞做了深入分析^[4], 1955 年 Mullins 对 O₂ 等离子体基础化学动力学进行了相关研究^[5], 2005 年 V. M. Shibkov 和 R. S. Konstantinovskij^[6] 对非平衡等离子体放电中 O₂ 等离子体的动力学行为等进行了较为详细的探讨。这些研究对等离子体点火与助燃的理论及实验发展具有十分重要的意义, 但是在初始温度对 O₂ 等离子体形成过程的影响方面成果较少。本文对此做了进一步研究。

1 物理化学模型

物理化学模型采用一维模型, 即只考虑各组分的随时间的变化, 不考虑扩散、漂移等空间过程, 这是由于 O₂ 等离子体的形成一般都被局限在一个小的空间里, 空间过程对 O₂ 等离子体产生过程的影响不大^[7]。设在 O₂ 形成等离子体后, 以一定温度、压力为初始条件, 对由文献[8]实验得到的电子、各种粒子浓度进行数值计算。该物理模型假设在一定时间之后各组分通过化学反应产生和消耗, 最终达到一定的平衡状态。

模型中的粒子成分和化学反应式考虑了 16 种反应物(见表 1), 其中中性粒子为 O, O₂, O₃, O^{*}(¹D), O^{*}(¹S), O₂^{*}(¹Δ_g), O₂^{*}(¹Σ_g⁺), O₂(³Σ_g⁻); 带正电粒子为 O⁺, O₂⁺, O₄⁺; 带负电粒子为 e, O⁻, O₂⁻, O₃⁻, O₄⁻。共计 56 个化学反应式, 参见文献[1-9]。

模型为^[10]:

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(t, x_1, x_2, \dots, x_i) \quad i = 1, 2, \dots, 16 \quad (1) \quad f_i = x_i \sum_{j=1}^{16} m_{ij} k_{ij} x_j + x_i \sum_{l=1}^{16} \sum_{j=1}^{16} m_{ijl} k_{ijl} x_j x_l \quad (2)$$

式中: x_i 为第 i 种组分的粒子浓度; f_i 为与第 i 种组分反应相关的函数; k_{ij} 和 k_{ijl} 分别为 i, j 组分之间的二体反应和 i, j, l 组分之间的三体反应的反应速率; m_{ij} 和 m_{ijl} 为系数, 当反应生成 i 组分时取 1, 消耗 i 组分时取 -1。

在计算过程中为了保证计算精度, 式(1)、式(2)的迭代计算采用精度控制, 即:

* 收稿日期: 2009-09-01

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(50776100)

作者简介: 王 峰(1983-), 男, 浙江临海人, 博士生, 主要从事等离子体点火与助燃数值模拟与实验研究;

E-mail: wangfeng1983@163.com

何立明(1959-), 男, 浙江上虞人, 教授, 博士生导师, 主要从事飞机推进系统气动热力理论与工程研究。

$$(m_{i+1} - m_i) m_i / < \eta \quad (3)$$

可利用数值 η 的大小控制计算精度, η 越小精度越高, 本文 η 取 10^{-6} 。

2 计算结果与分析

假设等离子体由 O_2 放电产生, 各反应式的反应系数见文献[1-9], 其中有些反应系数与大气温度、压力、电子温度有关, 电子温度为 2 eV, 电子初始浓度 $[e] = 5 \text{ mol/m}^3$, O_2 等离子体中初始浓度 $[O] = 1.2 \times 10^{-3} \text{ mol/m}^3$, $[O_2] = 4.8 \text{ mol/m}^3$, $[O_3] = 1.75 \times 10^{-1} \text{ mol/m}^3$, $[O^*] = 2 \text{ mol/m}^3$, $[O_2^*] = 2 \text{ mol/m}^3$, $[O^+] = 2.5 \text{ mol/m}^3$, $[O^-] = 1.3 \times 10^{-3} \text{ mol/m}^3$, $[O_2^-] = 1.25 \times 10^{-2} \text{ mol/m}^3$, 计算不同初始温度下各种主要成分粒子浓度随时间的变化过程。

图 1-3 为在 101 kPa 的压力时, 不同初始温度下 O_2 等离子体中各种主要成分粒子浓度随时间的变化过程。

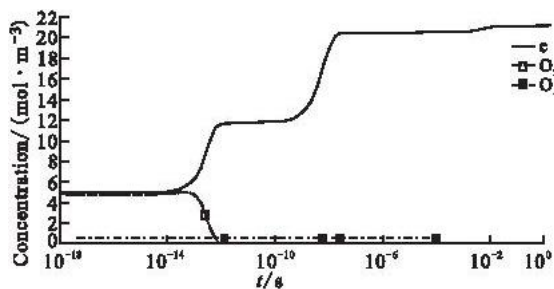


图 1 初温为 300 K 时, 粒子浓度随时间的变化过程

Fig. 1 With initial temperature of 300 K, the changing process of concentration of the particles at different time

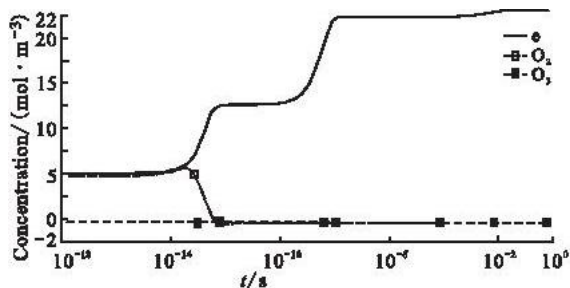
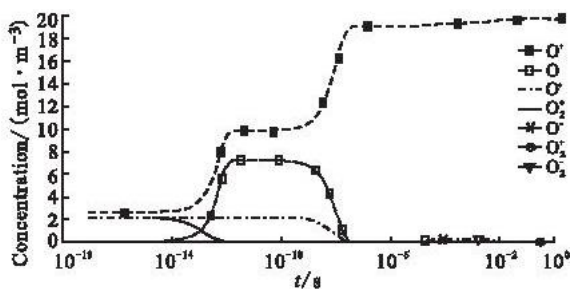


图 2 初温为 800 K 时, 粒子浓度随时间的变化过程

Fig. 2 With initial temperature of 800 K, the changing process of concentration of the particles at different time

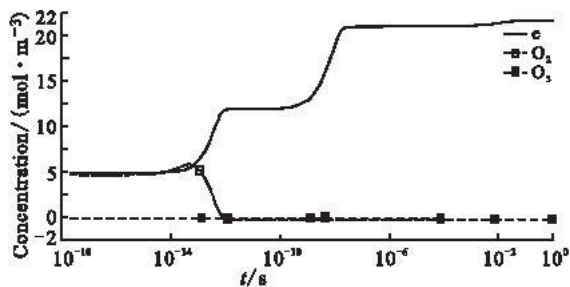
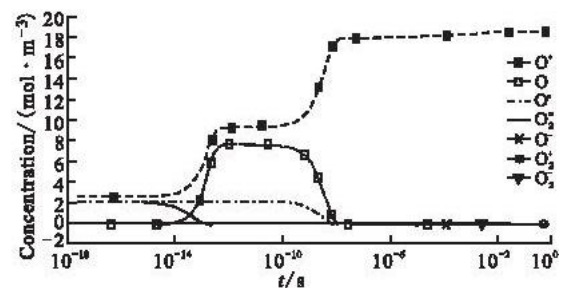


图 3 初温为 1500 K 时, 粒子浓度随时间的变化过程

Fig. 3 With initial temperature of 1500 K, the changing process of concentration of the particles at different time

由图 1-3 可以看出, 随着初始温度的升高, O_2 等离子体中各种主要成分粒子浓度的变化规律相似, 粒子浓度变化趋势受初始温度的影响不明显。电子浓度随时间增长不断增大, 主要是因为反应过程中不断有大量的电子产生, 而 O_2 在反应过程中主要作为反应物不断消耗, 生成物中产生的 O_2 很少, 故其浓度不断减小, 最终达到平衡状态, 浓度接近于 0。反应生成的粒子中 O^+ 浓度随着时间的增长不断增大, 最后稳定于平衡状态。 O 浓度随着时间的增长先增大后减小, 主要是由于反应刚开始进行时不断有 O 产生, 反应进行到一定程度后又不断消耗 O , 最终处于平衡状态, 浓度接近于 0。 O^* 、 O_2^* 随着时间的增长浓度不断减少, 最后浓度稳定于 0。 O^- 、 O_2^- 、 O_2^+ 随着时间的增长浓度略微有所起伏, 但浓度比较低, 几乎接近于 0, 主要是由于

反应过程中生成和消耗达到基本平衡。

从图 1-3 中还可以看出, e、O、O₂、O⁺ 为 O₂ 等离子体随时间变化过程中的主要粒子, 随着时间的增长变化比较大, 其次为 O⁻、O₂⁻、O₂⁺、O^{*}、O₂^{*} 等, 随时间变化相对较小, 但最终都达到一定的平衡状态。图 1-3 右图的粒子 O、O⁻、O₂⁻、O⁺、O₂⁺、O^{*}、O₂^{*} 等的浓度快速增大与减小由链式反应机理决定。在链式反应中, 大部分反应都和这些粒子相关, 它们能促进化学反应的进行。在化学反应开始时, 有很大一部分化学反应会产生这些活性粒子, 另一部分反应会消耗这些粒子, 由于这些粒子的活化能较低, 所以反应速度较快。反应过程中, 有些粒子产生的速度大于消耗的速度, 于是这些粒子浓度迅速增大, 而有些粒子浓度的消耗速度大于产生的速度, 这些粒子浓度快速减小, 最终达到平衡, O₂ 等离子体中活性粒子浓度减小。

活性粒子中, e、O₂、O、O⁻、O^{*}、O₂^{*} 的浓度比较大, 在化学反应中产生与消耗的速度也较大, 所以在 O₂ 等离子体随时间的变化过程中起主要作用。从图中可以看出, 化学反应开始时间很短, 大约在 10⁻¹⁴ s, 且很快达到稳定状态, 随着初始温度的升高, 反应速率变化不大, 这是由于反应速率常数 $K = AT^m \exp(-E/T)$ 或 $K = AT_e^m \exp(-E/T_e)$ (其中 A 为指前因子, m 为无因次温度指数, E 为化学反应活化能, T 为气体温度, T_e 为电子温度) 随着温度的升高变化不大, 因此反应速率变化不明显。但是化学反应过程中产生的活性粒子如 O、O⁻、O^{*}、O₂^{*} 等, 其活化能较低, 因此使得系统活性粒子的整体活化能降低, 有利于化学反应的进行。

3 结论

本文通过计算分析不同初始温度条件下 O₂ 等离子体中主要粒子浓度随时间变化情况, 得出以下结论:

- 1) 随着时间的增长, O₂ 等离子体中电子和 O⁺ 浓度不断增大, O 浓度先增大后减小, 其余粒子浓度不断减小, 最终都达到稳定状态;
- 2) 随着初始温度的升高, O₂ 等离子体中各种主要成分粒子浓度的变化规律相似, 且粒子浓度的变化趋势受初始温度的影响不明显;
- 3) 粒子的反应开始时间很短, 大约在 10⁻¹⁴ s, 且很快达到稳定状态, 反应速率受初始温度的影响比较小, 但随着初始温度的升高, 化学反应所需的时间逐渐缩短;
- 4) 用 O₂ 等离子体点火与助燃时, 应尽可能减小 O₂ 等离子体中活性粒子的浓度、降低活性粒子的活化能, 从而有效提高等离子体点火与助燃的效能。

参考文献:

- [1] Rodney Meyer, Bryan McEldowney, Naveen Chintala, et al. Experimental Studies of Plasma Assisted Ignition and MHD Supersonic Flow Control [R]. AIAA 2003 - 0873.
- [2] Ainan Bao, Guofeng Lou, Munetake Nishihara, et al. On the Mechanism of Ignition of Premixed CO - Air and Hydrocarbon - Air Flows by Nonequilibrium RF Plasma [R]. AIAA 2005 - 1197.
- [3] Williams S, Popovic S, Vuskovic L, et al. Model and Igniter Development for Plasma Assisted Combustion [R]. AIAA 2004 - 1012.
- [4] Klimov A, Bityurin V, Moralev I, et al. Plasma Assisted Ignition and Combustion [R]. AIAA 2005 - 3428.
- [5] Mullins B P. Spontaneous Ignition [M]. London: Butterworths Scientific Publications, 1955: 197 - 202.
- [6] Shihkov V M, Konstantinovskij R S. Kinetic Model of Ignition of Hydrogen - Oxygen Mixture under Conditions of Non - equilibrium Plasma of the Gas Discharge [R]. AIAA 2005 - 987.
- [7] 欧阳建明, 邵福球, 林明东. 含氧等离子体中臭氧形成过程数值模拟 [J]. 物理学报, 2008, 57(5): 3293 - 3297.
OUYANG Jianming, SHAO Fuqiu, Lin Mingdong. Numerical Simulation of Ozone Generation in Oxygenic Plasmas [J]. Acta Physica Sinica, 2008, 57(5): 3293 - 3297. (in Chinese)
- [8] Ulrich Kogelschatz. Dielectric Barrier Discharges - Their History Discharge Physics and Industrial Applications [J]. Plasma Chemistry and Plasma Processing, 2003, 23(1): 215 - 221.
- [9] 何立明, 苏建勇, 白晓峰. 等离子体气动激励改善气膜冷却效率的数值研究 [J]. 空军工程大学学报: 自然科学版, 2008, 9(3): 1 - 4.
HE Liming, SU Jianyong, BAI Xiaofeng. Numerical Investigation on Improvement of Film Cooling Efficiency with the Plasma Actuation [J]. Journal of Air Force Engineering University: Natural Science Edition, 2008, 9(3): 1 - 4. (in Chinese)
- [10] 欧阳建明, 邵福球, 王龙, 等. 一维大气等离子体化学过程数值模拟 [J]. 物理学报, 2006, 55(9): 4974 - 4979.
OUYANG Jianming, SHAO Fuqiu, WANG Long, et al. Numerical Simulation of Chemical Processes in One - dimensional Atmospheric Plasmas [J]. Acta Physica Sinica, 2006, 55(9): 4974 - 4979. (in Chinese)

(编辑: 徐敏)

(下转第 46 页)