

РАСЧЕТ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ ПО ЭНЕРГИЯМ В ИМПУЛЬСНОМ КОРОННОМ РАЗРЯДЕ

За допомогою методу Монте-Карло отримано функції розподілу електронів за енергіями в умовах імпульсного коронного розряду. Визначено характеристики для азоту, повітря, димового газу. Отримано залежності констант швидкостей дисоціації від приведеної напруженості електричного поля.

С помощью метода Монте-Карло получены функции распределения электронов по энергиям в условиях импульсного коронного разряда. Определены характеристики для азота, воздуха, дымового газа. Получены зависимости констант скоростей диссоциации от приведенной напряженности электрического поля.

ВВЕДЕНИЕ

Технологии очистки газовых выбросов от вредных примесей на основе импульсного коронного разряда (ИКР) конкурентоспособны по отношению к традиционным способам очистки. ИКР можно использовать для удаления примесей NO_x , SO_2 , органических веществ, конверсии CO_2 .

В ИКР создается слабоионизированная неравновесная плазма с температурой электронов, значительно превышающей температуру газа. Энергия электрического поля эффективно передается электронам без значительного повышения температуры газа.

В последние годы возрастает количество лабораторных исследований и публикаций на тему технологического использования ИКР. Существуют примеры коммерческих ИКР-установок производительностью более $10000 \text{ м}^3/\text{ч}$.

Теоретическое исследование процессов очистки газов затруднено в связи со сложностями моделирования стримеров, большим количеством плазмохимических реакций. Необходимы данные зависимостей транспортных параметров, констант скоростей реакций в газах от напряженности электрического поля.

Целью работы является нахождение и анализ функции распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ) в условиях ИКР для разных составов газов.

ФРЭЭ описывает кинетическое уравнение Больцмана. В связи со сложностью его решения, ФРЭЭ находят с помощью метода Монте-Карло, в котором моделируется динамика большого числа электронов.

ОПИСАНИЕ МЕТОДА

Составлена программа, в которой учитываются ускорение электронов в электрическом поле, процессы упругого рассеяния их на молекулах, возбуждения, ионизации, прилипания. Для этого используются соответствующие сечения процессов. При упругом столкновении учитывается анизотропное рассеяние.

Степень ионизации стримерной короны меньше 10^{-4} , поэтому можно пренебречь кулоновским взаимодействием между электронами [1].

ФРЭЭ устанавливается за время до 10 пс, при этом происходит до ста столкновений электрона с молекулами [2]. Результаты моделирования применимы для гидродинамического приближения электрического разряда, когда времена разрядных процессов значительно больше 10 пс.

Расчет проводится для однородного электриче-

ского поля в диапазоне $E/n = (10-1000) \text{ Тд}$, достаточного для условий стримерной короны, где максимальное E/n оценивается в $(200-500) \text{ Тд}$.

Структура векторов скорости электронов и напряженности поля: $\mathbf{v} \{v_x, v_y, v_z\}$, $\mathbf{E} \{0; 0; -E\}$. Начальное значение энергии электронов нулевое.

Вероятность столкновения электрона с молекулами компонента газовой смеси j с концентрацией n_j за время Δt :

$$P_j = n_j \cdot \sigma_{sj}(\varepsilon) \cdot v \cdot \Delta t, \quad (1)$$

где $\sigma_{sj}(\varepsilon)$ – суммарное сечение столкновений для компонента j .

Промежуток времени Δt составляет до 5 % периода столкновений электрона с молекулами газа. Тогда скорость и энергия электрона за время Δt изменятся незначительно.

Номер компонента j и процесса i определяются сравнением P_j и σ_{ij}/σ_{sj} со случайными числами $R \in [0; 1]$.

Изменение скорости электрона при движении в электрическом поле:

$$\Delta v_z = \frac{eE}{m} \cdot \Delta t. \quad (2)$$

Составляющие вектора скорости v_x, v_y изменяются только при столкновениях.

Кинетическая энергия электрона:

$$\varepsilon = m \cdot v^2 / 2. \quad (3)$$

При упругом столкновении электрон теряет незначительную часть энергии:

$$\varepsilon = \left(1 - \frac{2m}{M_k} \cdot (1 - \cos \theta) \right) \cdot \varepsilon_0, \quad (4)$$

где ε_0 – энергия электрона до столкновения; θ – угол рассеяния; m, M_k – массы электрона и молекулы компонента j [3].

При столкновении производится поворот вектора скорости на угол θ , при этом рассеяние считается азимутально-равновероятным.

При неупругом столкновении:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 - \Delta\varepsilon_i, \quad (5)$$

где $\Delta\varepsilon_i$ – энергия возбуждения молекулы для процесса i .

При ионизации энергия равновероятно распределяется между тестовым электроном и электроном, появившимся в результате ионизации:

$$\varepsilon = (\varepsilon_0 - \Delta\varepsilon_i) \cdot R, \quad R \in [0; 1]. \quad (6)$$

Для определения ФРЭЭ значения энергии элек-

трона фиксировались, начиная с момента времени, когда распределение можно считать установившимся. Всего учитывалось 10^8 значений энергии.

Расчеты проведены для давления газа 1 атм и температуры 20 °С. При этих условиях приведенной напряженности поля $E/n = 100$ Тд соответствует $E = 25$ кВ/см.

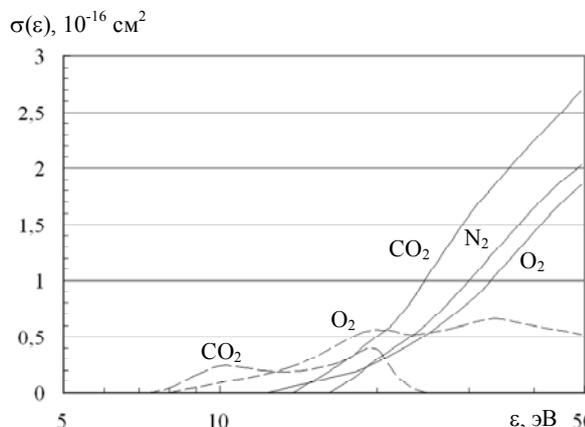


Рис. 1. Сечения ионизации (сплошная линия) и диссоциации (пунктирная линия)

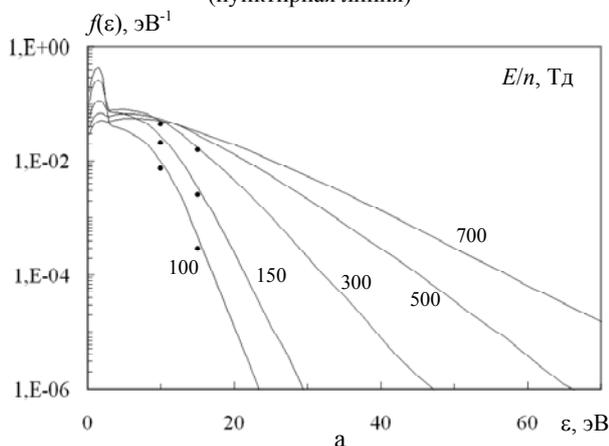


Рис. 3. ФРЭЭ (а) и характеристики (б) для азота

Рассеяние электрона из теории кулоновского экранирования:

$$\cos \theta = 1 - \frac{2R}{1 + 8(1-R)\epsilon/27,21}. \quad (8)$$

Модель рассеяния, учитывающая свойства молекул каждого вещества [2]:

$$\cos \theta = 1 - \frac{2R \cdot (1 - \xi)}{1 + \xi \cdot (1 - 2R)}. \quad (9)$$

Параметр ξ зависит от ϵ и определяется из соотношения транспортного и упругого сечений:

$$\frac{\sigma_{\text{од}}}{\sigma_{\text{дод}}} = \frac{1 - \xi}{2\xi^2} \cdot \left((1 + \xi) \cdot \ln \frac{1 + \xi}{1 - \xi} - 2\xi \right). \quad (10)$$

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА

Основные сечения неупругих столкновений взяты из [5]. Сечения упругих столкновений, ионизации и др. взяты из [6-8]. Сечения ионизации и диссоциации показаны на рис. 1.

На рис. 2 приведены зависимости $\xi(\epsilon)$ для моле-

Угол рассеяния определяют следующими способами.

Изотропное рассеяние, не учитывающее зависимость от энергии электрона:

$$\cos \theta = 2R - 1, \quad (7)$$

где R – случайное число из интервала [0; 1].

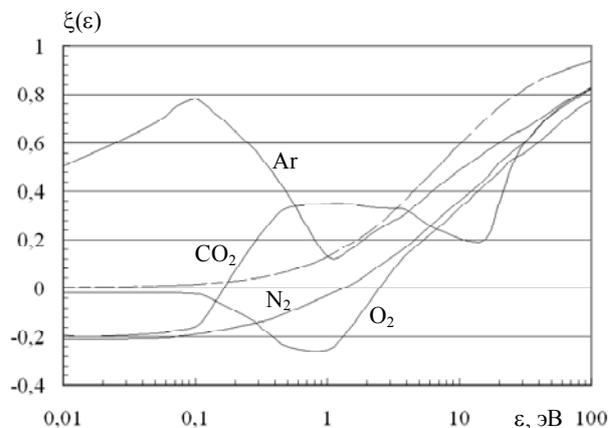
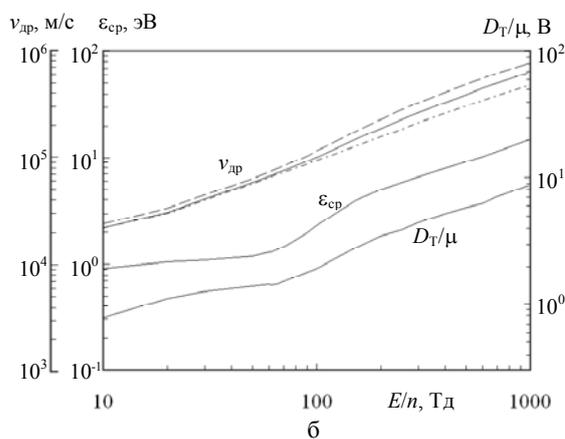


Рис. 2. Зависимости параметра ξ от энергии электрона



кул разных веществ, определенные по (10). Пунктирной линией показана $\xi(\epsilon)$, соответствующая модели рассеяния (8).

ФРЭЭ $f(\epsilon)$ для азота для некоторых значений параметра E/n приведены на рис. 3. Точками обозначены данные [9].

Использование (8) приводит к уменьшению угла рассеяния и повышению энергии электронов по сравнению с (9), высокоэнергетичная часть ФРЭЭ повышается, а для модели (7) – уменьшается на (15-20)%. Дрейфовые скорости электронов (рис. 3,б) для (7) (пунктирная линия) и (8) (штрихпунктирная линия) отличаются в 1,2-1,3 раза. Другие характеристики (ϵ_{cp} , D_T/μ) отличаются менее 5%.

В расчетах сухой воздух моделировался составом: $N_2/Ar/O_2 = 0,781/0,009/0,21$; дымовой газ: $N_2/Ar/O_2/CO_2 = 0,781/0,009/0,07/0,14$.

ФРЭЭ для этих газов приведены на рис. 4. Точками обозначены данные моделирования [8]. Пунктирной линией показано решение кинетического уравнения Больцмана в двучленном приближении.

Это приближение значительно занижает $f(\varepsilon)$ при больших энергиях [10].

В диапазоне энергий (15-20) эВ ФРЭЭ в азоте при 200 Тд на (10-30) % меньше, чем в воздухе. С повышением E/n эта разница уменьшается.

В наиболее населенной части ФРЭЭ (1-4) эВ суммарное сечение столкновений молекулы N_2 в 2-3 раза больше, чем O_2 и CO_2 , поэтому свободный пробег и энергия электронов в азоте меньше.

Из ФРЭЭ можно определить, что при 200 Тд энергией больше 10 эВ обладает 12 % электронов в азоте и 13 % в воздухе и дымовом газе.

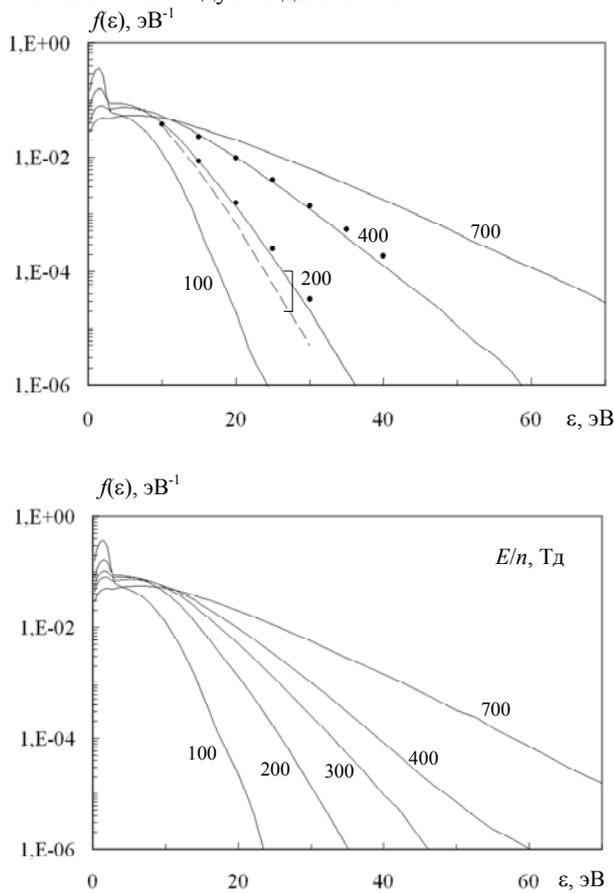


Рис. 4. ФРЭЭ и характеристики газовых смесей:
а) $N_2/Ar/O_2$; б) $N_2/Ar/O_2/CO_2$

Константы скоростей реакций [9]:

$$k_i = \int_0^{\infty} \sigma_i(\varepsilon) \cdot v \cdot f(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (12)$$

Ионизационный коэффициент Таунсенда для смеси газов:

$$\frac{\alpha}{n} = \frac{\sum N_j \cdot k_j}{v_{др}}, \quad (13)$$

где N_j , k_j – объемная доля и константа скорости ионизации компонента j газовой смеси.

Коэффициент поперечной диффузии электронов:

$$D_T = \frac{\Delta(\langle x^2 + y^2 \rangle)}{4\Delta t}, \quad (14)$$

где $\langle x^2 + y^2 \rangle$ – средний квадрат смещения электронов

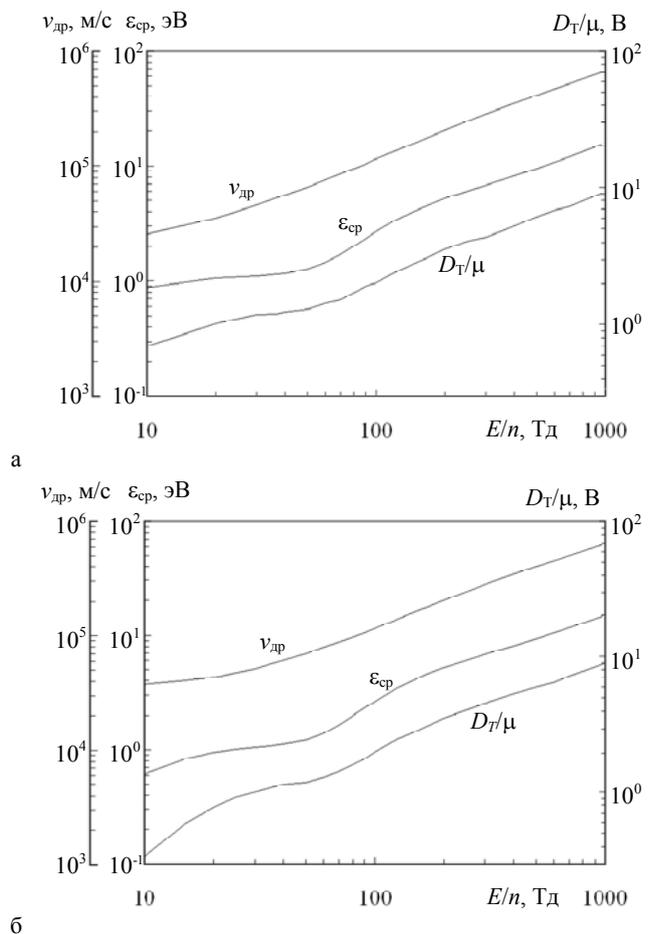
Суммарные сечения O_2 и CO_2 отличаются на (10-30) %, поэтому замена части O_2 на CO_2 в газовой смеси не приводит к значительному изменению ФРЭЭ, учитывая, что основную часть смеси составляет N_2 .

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ГАЗОВ

Дрейфовая скорость электронов $v_{др}$ определена усреднением составляющей v_z вектора скорости.

Подвижность электронов:

$$\mu = v_{др} / E. \quad (11)$$



а

б

в плоскости xOy в момент времени t [3].

Зависимости скорости дрейфа, средней энергии, коэффициента диффузии электронов от параметра E/n приведены на рис. 3, б и рис. 4.

Расчеты показывают, что средняя энергия электронов в азоте на (5-15) % меньше, чем в воздухе при $E/n = (100-300)$ Тд. Средняя энергия 10 эВ достигается при 600 Тд.

При изменении E/n от 100 Тд до 1000 Тд период столкновений электронов с молекулами в воздухе уменьшается с 0,35 пс до 0,15 пс.

На рис. 5 приведены зависимости ионизационного коэффициента Таунсенда от параметра E/n . В диапазоне $E/n = (100-300)$ Тд α/n для азота в 1,3-3 раза меньше, чем для воздуха, т.к. порог ионизации молекулы N_2 выше, чем O_2 (рис. 1).

При этом в воздухе и дымовом газе значения α/n отличаются на (3-5) %.

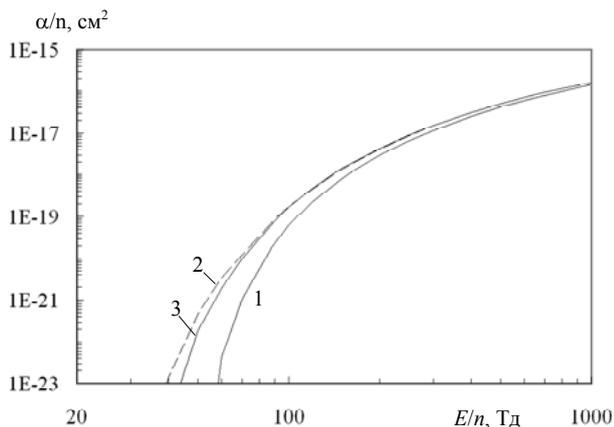


Рис. 5. Коэффициенты ионизации для газов:
1 – N₂; 2 – N₂/Ar/O₂; 3 – N₂/Ar/O₂/CO₂

С помощью ФРЭЭ и соответствующих сечений процессов можно определить константы скоростей диссоциации различных веществ, необходимые для анализа процессов обработки газов.

На рис. 6 приведены константы скоростей реакций с молекулами O₂ и CO₂ в дымовом газе: суммарной диссоциации (сплошная линия) и диссоциации с прилипанием электрона (пунктирная линия).

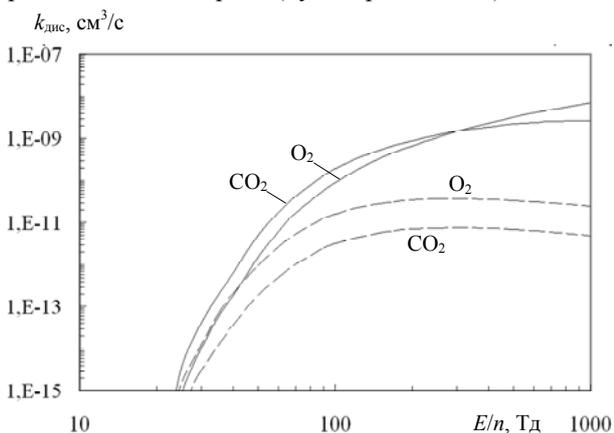


Рис. 6. Константы скоростей диссоциации для смеси N₂/Ar/O₂/CO₂

В результате диссоциации этих молекул образуются радикалы, которые участвуют в дальнейших химических превращениях.

Как и ионизация, диссоциация происходит в коронном разряде в области с повышенной напряженностью электрического поля при столкновении высокоэнергетичных электронов с молекулами газа.

При $E/n = (200-500)$ Тд константы скоростей суммарной диссоциации для O₂ и CO₂ имеют соизмеримые значения, которые на несколько порядков больше, чем для диссоциации с прилипанием электрона и на порядок больше константы скорости ионизации.

ВЫВОДЫ

С помощью метода моделирования Монте-Карло рассчитаны ФРЭЭ и характеристики газов, которые подвергаются обработке импульсным коронным разрядом. Результаты получены при $E/n = (10-1000)$ Тд для основных компонентов воздуха и дымовых газов.

Получены константы скоростей диссоциации в дымовом газе при различных значениях напряженности электрического поля.

Расчеты показывают, что ФРЭЭ и характеристики воздуха и дымового газа не отличаются значительно в диапазоне $E/n = (200-500)$ Тд.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. M.A. Tas, E.M. van Veldhuizen, "Plasma excitation processes in flue gas simulated with Monte Carlo electron dynamics", J. Phys. D: Appl. Phys. vol. 30, 1997, pp. 1636-1645.
2. Y.L.M. Creighton, W.R. Rutgers, E.M. van Veldhuizen, "In-situ Investigation of Pulsed Corona Discharge", Eindhoven University of Technology, EUT Report 93-E-279, 1993, 89 p.
3. B.T. Wu, D.M. Xino, "Electron swarm coefficients in SF₆ and CF₄ gas mixtures from Monte Carlo method", Eur. Phys. J. Appl. Phys., vol. 35, 2006, pp. 57-60.
4. A. Okhrimovskyy, A. Bogaerts, "Electron anisotropic scattering in gases: A formula for Monte Carlo simulations", Physical Review E, vol. 65, 037402, 2002, pp. 1-4.
5. A.V. Phelps, ftp://jila.colorado.edu/collision_data/electron.txt.
6. Y. Itikawa, "Cross Sections for Collisions of Electrons and Protons with Nitrogen Molecules", J. Phys. Chem. Ref. Data, vol. 15, № 3, 1986, pp. 985-1010.
7. Y. Itikawa, "Cross Sections for Collisions of Electrons and Protons with Oxygen Molecules", J. Phys. Chem. Ref. Data, vol. 18, № 1, 1989, pp. 23-42.
8. Y. Itikawa, "Cross Sections for Electron Collisions with Carbon Dioxide", J. Phys. Chem. Ref. Data, vol. 31, № 3, 2002, pp. 749-767.
9. Райзер Ю.П. Физика газового разряда. – М.: Наука, 1992. – 536 с.
10. F.J. Gordillo-Vazquez, "Electron energy distribution functions and transport coefficients relevant for air plasmas in the troposphere", vol. 18, № 3, 2009, pp. 034021.

Поступила 01.06.2010

Коняга Станислав Федорович, м.н.с.

НИПКИ "Молния" Национального технического университета "Харьковский политехнический институт"
Украина, 61013, Харьков, ул. Шевченко, 47
тел. (057) 707-61-83, e-mail: eft@kpi.kharkov.ua

S.F. Konjaga

Calculation of electron energy distribution function in impulse corona discharge.

Electron energy distribution functions are calculated with Monte-Carlo method in conditions of impulse corona discharge. Swarm parameters in nitrogen, air, flue gas are determined. Dissociation rate constants are calculated as functions of the reduced electric field strength.

Key words – energy distribution, swarm parameter, Monte-Carlo method, corona discharge.