

脉冲等离子体射流中OH自由基的生成机理

刘大伟¹, 徐茂源¹

强电磁工程与新技术国家重点实验室, 华中科技大学, 湖北省, 武汉市

简介: 等离子体射流实验通常在开放环境下进行, 这使得惰性气体、空气和水之间的反应变得复杂, 使得确定OH的主要来源变得困难。本文献建立了一个2D脉冲直流等离子体射流模型, 包含Heliumair-H₂O反应, 此模型可以用来分析OH等物质的产生机理。

计算方法: 本次仿真是采用的2D模型。核心的方程包括一组带电和中性物质的连续性耦合方程, 电子能量传递方程。除此以外, 我们还使用了Navier-Stokes方程和对流扩散方程计算了介质管中氦气和空气的摩尔分数。

$$\phi_1 \rho_1 \frac{\partial \mathbf{u}_1}{\partial t} + \phi_1 \rho_1 (\mathbf{u}_1 \cdot \nabla) \mathbf{u}_1 = \nabla \cdot [-p \mathbf{I} + \phi_1 (\mu_1 + \mu_T) (\nabla \mathbf{u}_1 + (\nabla \mathbf{u}_1)^T)] + \phi_1 \rho_1 \mathbf{g} + \mathbf{F}$$

Helium-air-H ₂ O chemistry (molecules-meters-Kelvin)						
Reaction No.	Reaction	A	B	C	Activation energy	References
R1	$e + H_2O \rightarrow 2e + H_2O^+$				Cross section data	21
R2	$e + H_2O \rightarrow H + OH + e$				Cross section data	21
R3	$e + H_2O^+ \rightarrow H + OH$	7.11×10^{-10}	-0.5	0	0	22
R4	$e + H_2O^+ \rightarrow H + H + O$	3.1×10^{-10}	-0.5	0	0	22
R5	$OH + H + M \rightarrow H_2O + M^a$	4.3×10^{-37}	0	0	0	22
R6	$O(1D) + H_2O \rightarrow OH + OH$	2.2×10^{-16}	0	0	0	22
R7	$OH + OH \rightarrow O + H_2O$	2×10^{-18}	0	0	0	22
R8	$O + OH \rightarrow H + O_2$	3.32×10^{-17}	0	0	0	22
R9	$O + H + M \rightarrow OH + M^a$	1.62×10^{-45}	0	0	0	22
R10	$H + O_2 \rightarrow OH + O$	3.55×10^{-28}	0	0	0	22
R11	$OH + M \rightarrow O + H + M^a$	4.15×10^{-88}	0	0	0	22
R12	$H_2O + O \rightarrow OH + OH$	2.34×10^{-21}	0	0	0	22
R13	$He^+ + H_2O \rightarrow H_2O^+ + He$	6.05×10^{-17}	0	0	0	22
R14	$He^+ + H_2O \rightarrow e + H_2O^+ + He$	6.6×10^{-16}	0	0	0	22
R15 ^b	$He_2^+ + H_2O \rightarrow e + 2He + H_2O^+$	6×10^{-16}	0	0	0	22

表1. 仿真中所涉及到的Heliumair-H₂O反应

图1为0.3s时的实验图像, 这与仿真模型是一致的。其中蓝色的方形是玻璃管内的电极。白色虚线代表着玻璃管。红色虚线则是发生反应的位置。

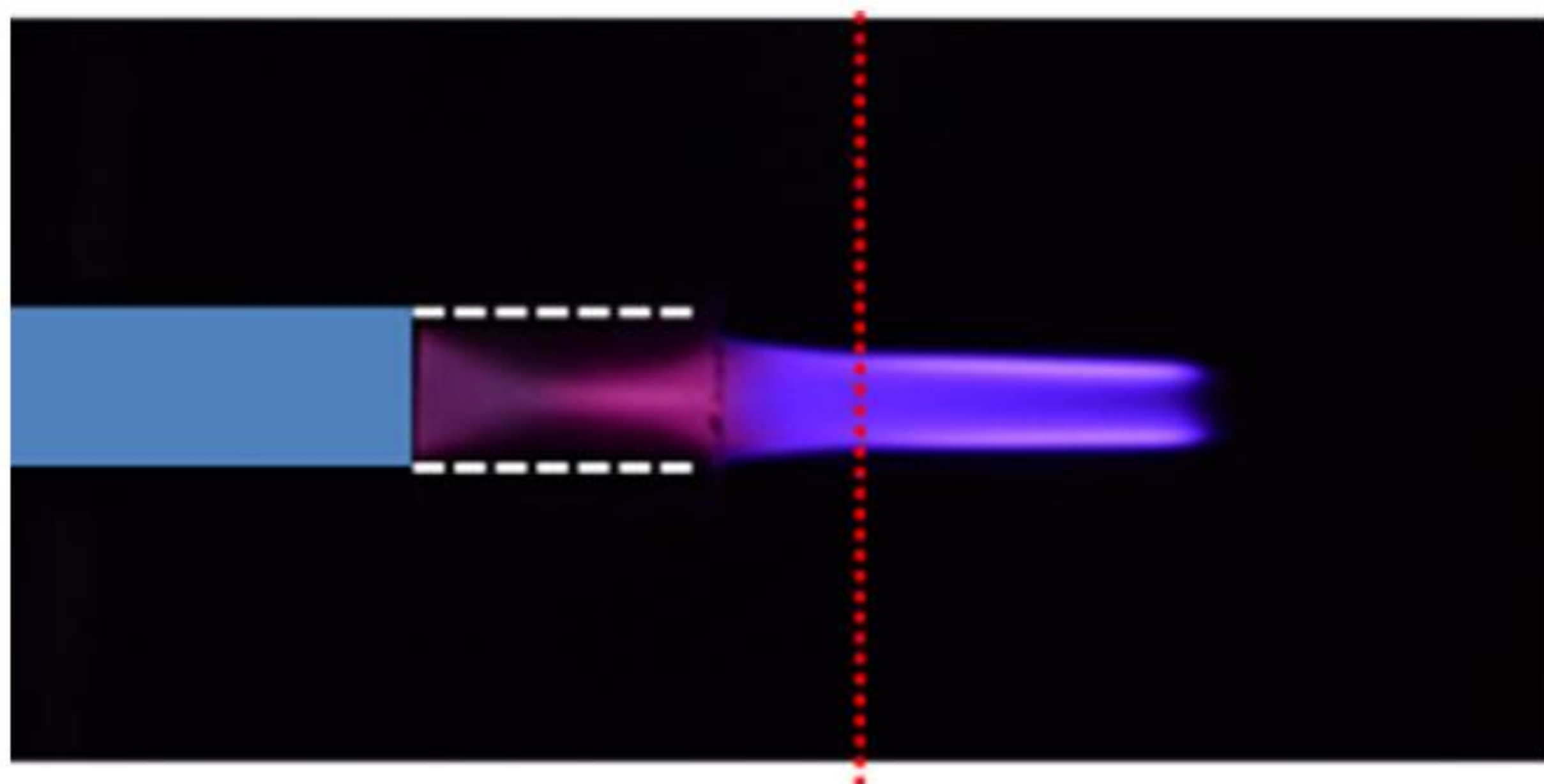


图 1.0. 3s时的实验图像

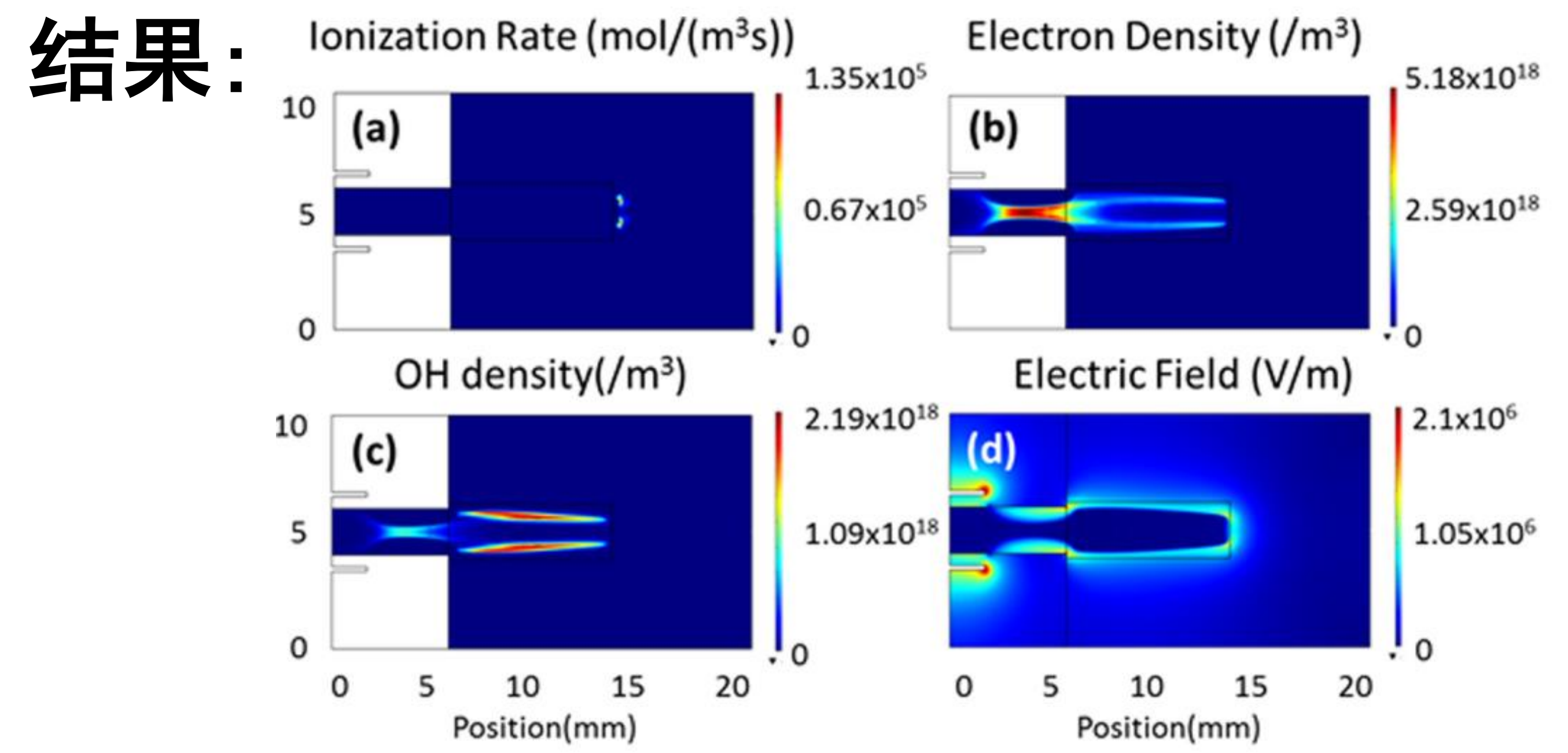


图 2. 176ns时等离子体射流的电离率 (a), 电子密度 (b), OH基密度 (c) 和电场分布 (d)

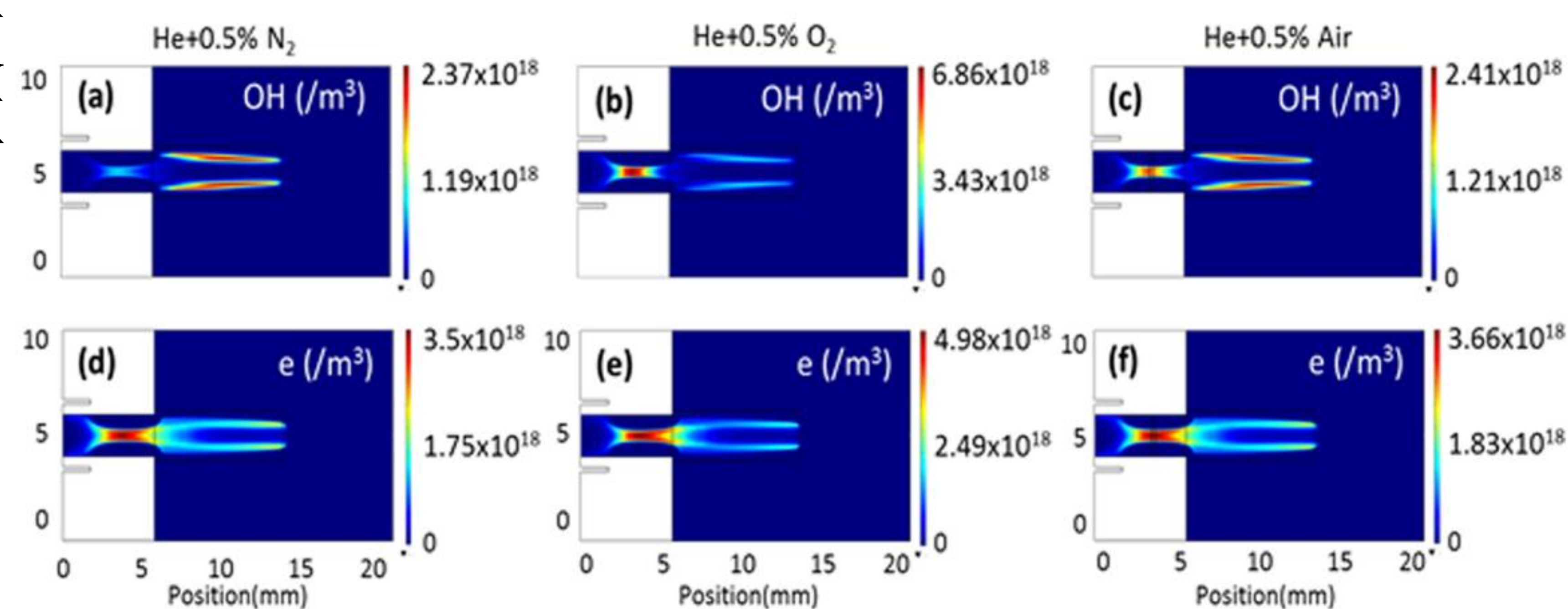


图 3. 170ns时不同气体比例下的OH基密度和电子密度分布

结论: 根据仿真结果, 图 (2) b的电子分布密度图可以得出等离子体通道的尺寸与长曝光时间图像中 (即图 (1)) 所显示的等离子体通道相一致, 由图 (2) c和d可以得出管内的等离子体鞘层不仅将电子压缩到沿管轴的细长通道, 而且也使得OH在该通道中浓缩。图3展示了不同气体比例下OH与电子密度的不同分布, 可以看出, 高氧气浓度区域下氧原子对于OH的产生具有促进作用, 而额外的氮气和空气对于环状等离子体通道的影响并不显著。这些结果与脉冲DC驱动等离子体射流在卫生保健, 医药, 材料科学和纳米技术中的多个应用相关, 同时也与反应中自由基等物质的精确控制有关。

参考文献:

1. M. G. Kong, G. Kroesen, G. Morfill, T. Nosenko, T. Shimizu, J. van Dijk, and J. L. Zimmermann, New J. Phys. 11, 115012 (2009)
2. X. Lu, G. V. Naidis, M. Laroussi, and K. Ostrikov, Phys. Rep. 540, 123 (2014)
3. X. Lu, M. Laroussi, and V. Puech, Plasma Sources Sci. Technol. 21, 034005 (2012)