

1566473

На правах рукописи

УДК 537.562

Корышев Олег Владимирович

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ И ТРАНСПОРТНЫХ
СВОЙСТВ ПЛАЗМЫ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ

01.04.14 - Теплофизика и молекулярная физика.

Автореферат

диссертации на соискание учёной степени

кандидата технических наук

Москва 2000

Работа выполнена в Московском Государственном техническом университете им. Н.Э.Баумана

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук, профессор Ю.С.Протасов

Официальные оппоненты:

д.т.н., профессор –

Нефедов Анатолий Павлович

к.т.н., доцент –

Дорофеев Анатолий Александрович

Ведущая организация:

Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова,
Физический факультет

Защита диссертации состоится "22 мая 2000 г. в 14.30
час на заседании диссертационного Совета К.053.15.08 в Московском
Государственном техническом университете им. Н.Э.Баумана по адресу:
107005 Москва, Лефортовская наб., д. 1, ф-т "Энергомашиностроение".

в библиотеке университета.

кз., заверенный печатью, просим
Бауманская ул., д 5, МГТУ им.
диссертационного Совета К.053.15.08
22 2000 г

Ю.Н.Кутуков

15-66473

НТБ МГТУ им. Н.Э.Баумана



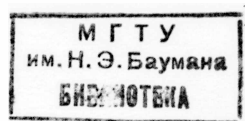
1566473

Корышев О.В. Исследование

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ.

1566473
Актуальность темы: среди передовых научно-технических программ на современном этапе видное место занимают высокие технологии и среди них – плазменные и фотонные. Актуальность разработок плазменных систем далеко не исчерпывается известными к настоящему времени способами их применения. С использованием низкотемпературной плазмы связан ряд перспективных проектов, призванных внести существенные изменения в общую и специальную энергетику, машиностроение и другие отрасли наукоемких производств. С разработкой плазменных систем постоянно расширяется как диапазон изменения основных параметров плазмы, так и номенклатура плазмообразующих веществ, при этом особенно актуальной становится проблема создания электронных банков и баз данных по термодинамическим, оптическим, переносным (транспортным) свойствам плазмы рабочих веществ (газов, металлов, диэлектриков) широкого химического и ионизационного состава.

При значительной научной и технологической потребности в основных характеристиках низкотемпературной плазмы имеется весьма ограниченный объем информации такого рода. Это связано, во-первых, с принципиальными физическими трудностями, возникающими при многофакторном анализе свойств плазмы высокой плотности ($n_0 > 10^{17} \text{ см}^{-3}$) из-за мало изученного влияния плазменного окружения на внутренние состояния атомов и ионов (т.н. неидеальность плазмы); во-вторых, с большой трудоемкостью вычислений; в-третьих, с проблемой надежного представления, автоматизированной обработки, хранения и использования полученной информации. Исходя из реальных потребностей численного и физического



моделирования в радиационной газо- и плазмодинамике, физике высоких плотностей энергии наибольший практический интерес представляют данные о термодинамических (внутренней энергии, энтальпии, энтропии и др.), транспортных (коэффициентах электро- и теплопроводности, диффузии, вязкости и др.) и оптических (коэффициенты поглощения) свойствах низкотемпературной плазмы.

Генерация широкодиапазонных банков данных по термодинамическим, транспортным и оптическим свойствам плазмы сложного ионизационного и химического состава является сложной задачей, т.к. должна вестись двумя путями: как расчетно-теоретическим, так и экспериментальным. Дополнительное требование к методам наполнения банков данных – их универсальность, т.к. сложно предсказать полную номенклатуру веществ и соединений, данные о которых могут потребоваться в конкретном инженерном анализе широкого спектра плазменных устройств и систем в будущем. Таким образом, задача генерации банков данных по термодинамическим, переносным и оптическим свойствам многокомпонентной многократно ионизованной плазмы связана с:

1) созданием комплекса программ для расчета ионизационного состава, термодинамических, транспортных и оптических свойств многокомпонентной плазмы в широком диапазоне изменения основных ее параметров (температуры, концентрации). Такой комплекс должен удовлетворять следующим требованиям: во-первых, он должен выполнять большое число чисто вычислительных операций (учет только элементарных процессов требует вычислять сечения и другие сопряженные характеристики как минимум $\sim 10^4$ актов); во-вторых – поддерживать достаточно объемную базу данных по квантовомеханическим состояниям атомов и ионов (до 10^3 состояний на каждый ион, десятки тысяч состояний на элемент); в-третьих – должен быть открыт для дальнейшего развития и модификации, позволять с

малыми затратами заменять или добавлять новые физические методики расчета и анализа; в-четвертых – позволять получить результаты с минимальными затратами времени;

2) проведением непосредственно процедуры генерации банков данных термодинамических, транспортных и оптических свойств многокомпонентной плазмы на основе разработанного комплекса программ. Такой банк данных должен представлять информационную систему (ИС), которая позволяла бы пользователям получать необходимую справочную информацию в максимально удобном виде, быть легко модифицируемой в соответствии с изменением расчетных моделей.

Среди веществ, физико-химические свойства плазмы которых требуют дальнейшего изучения, значительное место занимают инертные газы: He, Ne, Ar, Kr, Xe. Они широко применяются в качестве рабочих сред разнообразных плазменных устройств и установок как научно-исследовательского, так и промышленно-технологического назначения. Применение инертных газов в плазменной технике обусловлено, в первую очередь, квантовомеханической завершённостью строения электронных оболочек их атомов и высокой химической совместимостью инертных газов с конструкционными материалами плазменных устройств и систем.

Актуальность создания и совершенствования баз и банков данных по термодинамическим, транспортным и оптическим свойствам плазмы инертных газов, квантовомеханическим характеристикам их атомов и ионов, обусловлена общим направлением развития плазменной техники и технологии, связанного с расширением диапазона достигаемых параметров плазмы.

Цель работы – создание банков данных термодинамических и транспортных свойств плазмы инертных газов (He, Ne, Ar, Kr, Xe) в широком

диапазоне изменения основных параметров: температуры ($T \sim 5 - 5000$ кК), плотности ($\rho \sim 10^{-4} - 10^2$ кг/м³).

Научная новизна заключается в том, что:

1. Создан машиночитаемый банк данных по ионизационному составу, термодинамическим (давление, внутренняя энергия, энтальпия, энтропия, изобарная и изохорная теплоемкости, адиабатная скорость звука, термическое уравнение состояния) и транспортным (электропроводность, термо-э.д.с., теплопроводность, вязкость) свойствам плазмы инертных газов (He, Ne, Ar, Kr, Xe) в диапазонах: температур – $T \sim 5 - 5000$ кК, плотностей – $\rho \sim 10^{-4} - 10^2$ кг/м³ (для термодинамических функций) и $\rho = 10^{-4} - 10$ кг/м³ (для транспортных свойств).

2. Разработан оптимизированный комплекс методик для массовых расчётов термодинамических функций и коэффициентов переноса многокомпонентной равновесной плазмы, отличающийся оригинальным способом расчёта транспортных сечений рассеяния электронов на атомах.

3. Численно исследованы термодинамические и транспортные свойства плазм инертных газов (He, Ne, Ar, Kr, Xe) в ранее не изучавшихся интервалах температур и плотностей.

Практическая значимость работы состоит в том, что полученные данные необходимы при проектировании широкого круга плазменных процессов и устройств, использующих в качестве рабочих веществ инертные газы. Предложенный комплекс методик и программ может быть использован для численного исследования термодинамических и транспортных свойств равновесной многокомпонентной плазмы не только инертных газов, но и других самых разнообразных веществ, имеющих важное научное и прикладное значение.

Автор выносит на защиту:

– результаты численного исследования ионизационного состава, термодинамических функций, коэффициентов переноса равновесных плазм He, Ne, Ar, Kr, Xe в диапазоне температур $T \sim 5 - 5000$ кК и плотностей $\rho \sim 10^{-4} - 10^2$ кг/м³;

– комплекс методик и тестовые результаты расчётов термодинамических функций и коэффициентов переноса равновесной многокомпонентной атомарной плазмы инертных газов в широком диапазоне изменения основных параметров (концентрации, температуры);

– программный комплекс для расчёта термодинамических и транспортных свойств плазмы инертных газов.

Апробация работы.

Основные положения и результаты работы докладывались на IV Межгосударственном симпозиуме по радиационной плазмодинамике 1997; Москва, Россия; Международной конференции, посвященной 145-летию со дня рождения В.Г. Шухова Москва, Россия, 5-9 октября 1998 г.; XXV Гагаринских чтениях (Международная молодежная научная конференция) Москва, Россия, 6-10 апреля 1999 г.

Структура и объём работы.

Работа состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы и приложения, содержит 146 стр. основного текста, 86 рисунков, 10 таблиц, библиография 150 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ.

Во введении рассмотрена актуальность генерации банков данных по термодинамическим и теплофизическим свойствам плазмы инертных газов. Сформулирована задача исследований и разработок программных комплексов.

В главе 1 обоснована необходимость создания и рассмотрены общие принципы построения машиночитаемых баз данных по энергетическим состояниям атомов и ионов, а также по транспортным сечениям рассеяния электронов на ионах и атомах; приведён перечень источников таких данных; предложена иерархия структуры данных и рассмотрен интерфейс с комплексом программ. Приводятся примеры основных структурных элементов базы данных.

В главе 2 приведены результаты по алгоритмизации методик расчёта, которые были использованы при генерации банков данных термодинамических и транспортных свойств равновесной неидеальной плазмы инертных газов.

Парциальный состав и термодинамические функции многокомпонентной плазмы определялись путем решения уравнений Саха-Эккерта с учётом неидеальности (по кольцевому приближению в большом каноническом ансамбле).

Основные положения и допущения методик расчета транспортных коэффициентов состоят в следующем:

1. Плазма рассматривается как однородная квазинейтральная газообразная смесь свободных электронов и тяжелых частиц – атомов различных видов и их ионов различной кратности, молекулярные и интермолекулярные образования (столкновительные комплексы, кластеры и т.п.) не учитываются.

2. Процессы ионизации атомов и ионов считаются обратимыми химическими реакциями. Данная модель плазмы широко известна как "химическая" и наиболее часто применяется для решения практических задач.

3. Процессы переноса (электропроводность, теплопроводность, диффузия) рассматриваются в приближении локального термодинамического равновесия (ЛТР).

4. Использовано допущение бесконечно малой массы электрона по сравнению с массой иона либо атома, которое позволяет: во-первых, считать, что перенос заряда в плазме осуществляется только электронами; во-вторых, пренебречь влиянием электронов на вязкость; в-третьих, рассматривать поток тепла в плазме как сумму электронной и ионной составляющих. Таким образом, коэффициенты переноса разделяются на электронные (электропроводность, термо-э.д.с., электронная теплопроводность) и ионные (ионная и реактивная теплопроводности, вязкость), причем первые рассчитываются отдельно от вторых.

5. Перенос энергии связанными электронами не рассматривается. Влияние возбужденных состояний атомов и ионов учитывается лишь при расчете тепловых эффектов реакций ионизации. Все столкновения частиц считаются упругими за исключением перезарядки атома на собственном однозарядном ионе.

Электронные коэффициенты переноса рассчитывались по формулам Фроста. Ионные коэффициенты переноса вычислялись методами Чепмена-Энскога: вязкость – методом первого порядка, ионная теплопроводность – методом второго порядка.

Потенциалы взаимодействия тяжелых заряженных частиц считались кулоновскими, экранированными по Дебаю, что методологически соответствует учету плазменной неидеальности с помощью кольцевого приближения.

Все расчётные алгоритмы реализованы в виде единого программного комплекса «ТОТ» (Термодинамика, Оптика и Транспорт). При разработке общей структуры комплекса исходили из того, что он должен совмещать в себе большое количество чисто вычисленных операций и поддержку достаточно объемной базы данных, а также быть открытым для расширения.

Учитывая все эти требования, был использован объектно-ориентированный подход к построению программ. В соответствии с этим предмет моделирования – плазма – был представлен несколькими уровнями рассмотрения (детализации). Самый верхний уровень – это «смесь», как совокупность составляющих ее химических элементов, характеризуемая набором параметров (температура, плотность, давление и т.д.). Следующий уровень – это «элемент» (химический), как совокупность ионов различной кратности, характеризуемый своим набором параметров (атомный номер, вес и т.д.). Далее следуют: «ион», как совокупность возможных энергетических состояний, «состояние», описываемое конфигурацией электронных оболочек, и «оболочка», характеризуемая набором квантовых чисел и количеством электронов. Каждому уровню детализации поставлен в соответствие базовый тип переменной – объект, объединяющий в себе данные и методы их обработки. Структурная схема комплекса приведена на рис.1. Комплекс отличается высокой степенью гибкости, и легко интегрируем (полностью либо фрагментарно) в любые САПР.

Глава 3 посвящена описанию результатов тестирования программного комплекса «ТОТ» и анализу степени достоверности полученных результатов. Методическая погрешность ряда процедур комплекса программ «ТОТ» проверялась путём сравнения результатов расчёта термодинамических функций и транспортных свойств плазмы инертных газов с аналогичными расчётами, выполненными по другим алгоритмам и программным средствам. Для сравнения использовались те области температур и плотностей плазмы, где имеется обширный набор расчетных данных, и все теоретические модели дают одинаковые результаты. Для термодинамических функций – это область начала ионизации (рис. 2). Для коэффициентов переноса – область полностью ионизованной идеальной плазмы (рис. 3).

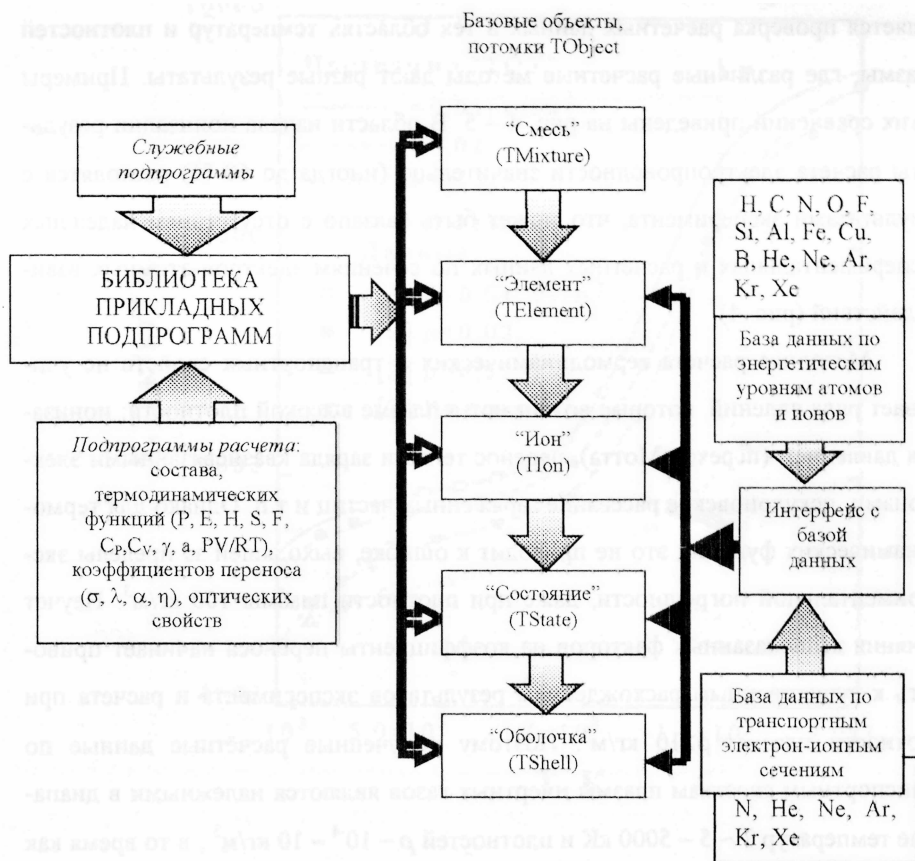


Рис. 1. Структурная схема комплекса программ "ТОТ" (Термодинамика, Оптика и Транспорт)

В этих областях расхождения с экспериментальными и теоретическими расчетными данными ряда авторов составляют менее 5% (Рис. 2-3).

Целью сравнений результатов расчета с экспериментальными данными является проверка расчетных данных в тех областях температур и плотностей плазмы, где различные расчетные методы дают разные результаты. Примеры таких сравнений приведены на рис. 4 – 5. В области начала ионизации результаты расчета электропроводности значительно (иногда до 60 %) расходятся с результатами эксперимента, что может быть связано с отсутствием надежных экспериментальных и расчетных данных по сечениям электрон-атомных взаимодействий (рис. 4).

Методика расчета термодинамических и транспортных свойств не учитывает ряда явлений, которые возникают в плазме высокой плотности: ионизация давлением (переход Мотта), перенос тепла и заряда квазисвязанными электронами, некулоновское рассеяние заряженных частиц и т.п. Однако для термодинамических функций это не приводит к ошибке, выходящей за пределы экспериментальной погрешности, даже при плотности плазмы 100 кг/м^3 . Неучет влияния вышеназванных факторов на коэффициенты переноса начинает приводить к существенным расхождениям результатов эксперимента и расчета при плотности плазмы $\rho \geq 10 \text{ кг/м}^3$. Поэтому полученные расчетные данные по транспортным свойствам плазмы инертных газов являются надежными в диапазоне температур $T \sim 5 - 5000 \text{ К}$ и плотностей $\rho \sim 10^{-4} - 10 \text{ кг/м}^3$, в то время как данные по термодинамическим функциям корректны в диапазоне плотностей $\rho \sim 10^{-4} - 10^2 \text{ кг/м}^3$ и температур $T \sim 5 - 5000 \text{ К}$.

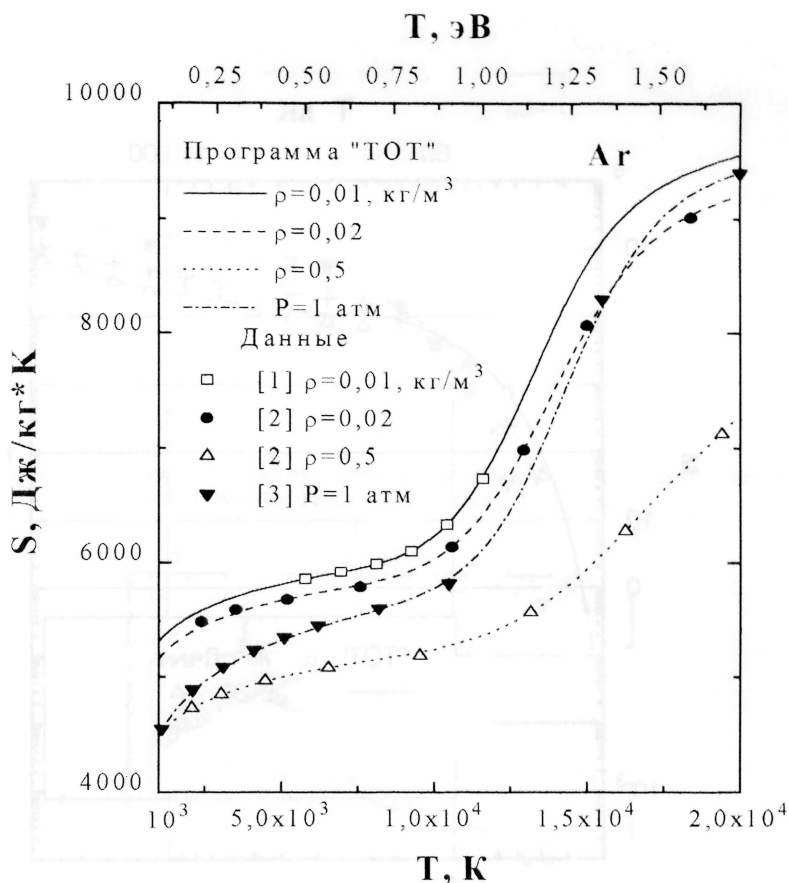


Рис. 2. Сравнение результатов расчета энтропии плазмы аргона с данными других авторов ([1] – Программа ASTRA (Ватолин Н.А., Моисеев Г.К. Трусов Б.Г. Термодинамическое моделирование в высокотемпературных неорганических системах. – М.: Металлургия, 1994. – 352 с.), [2] – Кацнельсон С.С. Ковальская Г.А. Теплофизические и оптические свойства аргоновой плазмы. – Новосибирск: Наука, 1985. – 149с., [3] – Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справ. изд.: В 4 т. /Л.В. Гурвич, И.В. Вейц, В.А. Медведев и др. Под ред. В.П. Глушко. – 3-е изд., переаб. и расшир. – М.: Наука, 1974-1982 – 4 т.).

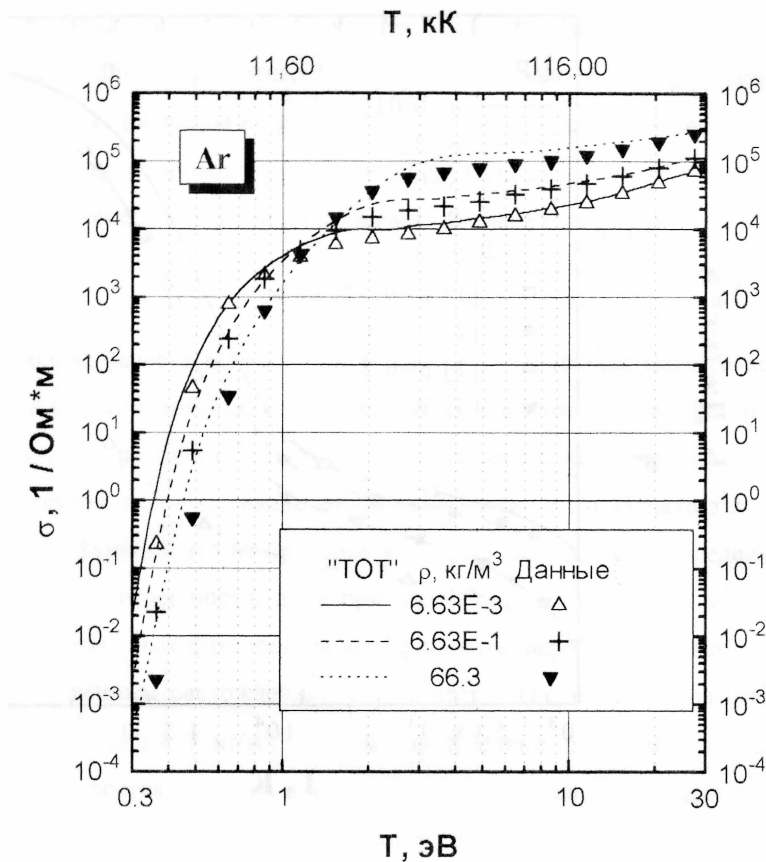


Рис. 3. Сравнение результатов расчета электропроводности плазмы аргона с данными: Калиткин Н.Н. Кузьмина Л.В. Рогов В.С. Таблицы термодинамических функций и транспортных коэффициентов плазмы. – М.: Изд-во ИПМ АН СССР, 1972. – 112 с.

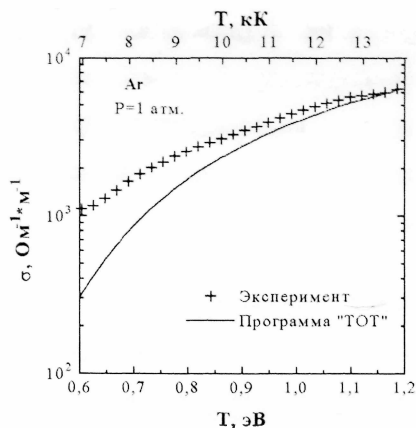


Рис. 4. Сравнение результатов расчета электропроводности плазмы аргона с данными эксперимента (Emmons H.W. // Phys.Fluids - 1967-v.10,N.6-p.1125-1136.)

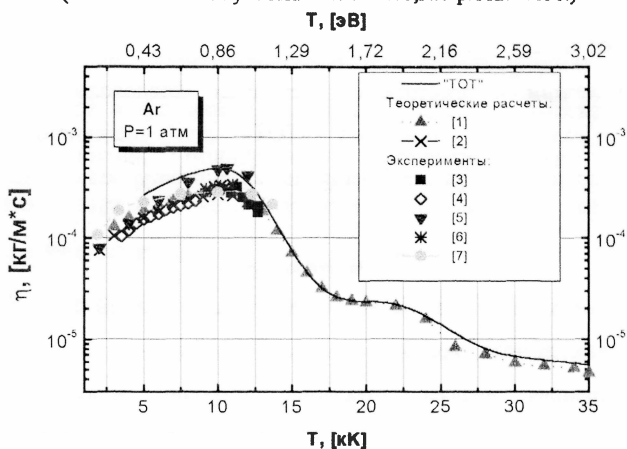


Рис. 5. Сравнение результатов расчета вязкости плазмы аргона с данными других авторов ([1]- Devoto R.S. //Phys.Fluids.-1973-vol.16,N5.-p.616-623., [2]-Кулик П.П. //ТВТ.-1971.-т.9,Вып.2.-с.431-432., [3]-Schreiber P.W. Hunter II A.M. //Phys. Fluids.-1971.-vol.14,N 12.-p.2696-2702., [4]-Aeschliman D.P. Cambel A.B. //Phys.Fluids.-1970.-vol.13,N 10.-p.2466-2477., [5]- Асиновский Э.И. Пахомов Е.П. //ТВТ-1967.-т.5,Вып.6.-с.962-969., [6]- Асиновский Э.И. Пахомов Е.П. Ярцев И.М. //ТВТ-1978.-т.16,Вып.1.-с.28-36., [7]- Кандзава, Кимура //РТИК.-1967.-т.5,Вып.7.-с.124-129.)

В главе 4 описываются основные результаты численного моделирования ряда термодинамических функций (давления, внутренней энергии, энтальпии, энтропии, изобарной и изохорной теплоемкостей, эффективного показателя адиабаты, скорости звука) и коэффициентов переноса (электропроводности, термо-э.д.с., теплопроводности и вязкости) равновесных неидеальных плазм инертных газов в диапазоне температур $T \sim 5 - 5000$ кК и плотностей $\rho \sim 10^{-4} - 10^2$ кг/м³, представляемые в табличном и графическом виде.

Электронные и ионные составляющие транспортных коэффициентов плазмы инертных газов представляются таким образом, чтобы обеспечить оптимальные возможности их использования для численного моделирования процессов переноса в равновесной частично замагниченной плазме любого химического состава.

В приложении к диссертации приведены псевдокоды пакетов основных подпрограмм – элементов комплекса «ТОТ» для численного моделирования термодинамических и транспортных функций низкотемпературной плазмы.

Основные выводы.

Для плазмы инертных газов – He, Ne, Ar, Kr, Xe – создан единый машиночитаемый банк физико-химических данных, который включает в себя: термодинамические функции (давление, внутренняя энергия, энтальпия, энтропия, изобарная и изохорная теплоемкости, адиабатная скорость звука, термическое уравнение состояния) плазмы в диапазоне температур $T \sim 5 - 5000$ кК и плотностей $\rho \sim 10^{-4} - 10^2$ кг/м³; транспортные функции (электропроводность, термо-э.д.с, теплопроводность, вязкость) плазмы в диапазоне температур $T \sim 5 - 5000$ кК и плотностей $\rho \sim 10^{-4} - 10$ кг/м³; базы данных по: квантовомеханическим характеристикам атомов и ионов, транспортным сечениям рассеяния электронов на атомах. Генерация такого

банка данных является необходимым этапом по созданию системы автоматизированного проектирования плазменных устройств.

2. Разработан комплекс методик расчета ионизационного состава, термодинамических функций и транспортных коэффициентов равновесной неидеальной многокомпонентной атомарной плазмы инертных газов, использование которого позволяет проводить многопараметрическую оптимизацию рабочих процессов в технологических и энергетических плазменных установках, использующих в качестве активных сред вещества сложного химического состава.

3. Создан программный комплекс для расчета ионизационного состава, термодинамических функций и транспортных коэффициентов равновесной неидеальной многокомпонентной атомарной плазмы инертных газов. Применение объектно-ориентированного подхода и формат представления входной и выходной информации позволили сделать комплекс открытым для дальнейшего развития, поддерживать объемную базу данных (по квантовомеханическим состояниям атомов и ионов, а так же транспортным сечениям рассеяния электрона на атоме) и обеспечить широкие возможности использования комплекса «ТОТ» в задачах численного моделирования и многопараметрического анализа широкого спектра плазменных устройств и систем.

Основные результаты диссертации отражены в работах:

1. О создании и развитии банка данных по термодинамическим, оптическим и переносным свойствам плазмы («ТОП-МГТУ») / К.Э. Бондаренко, О.В. Казаков, О.В. Коришев и др. // Тез. докл. IV Межгосударственного симпозиума по радиационной плазмодинамике.- М., 1997.- С. 16-18.

2. Термодинамические, оптические и транспортные свойства рабочих веществ плазменных и фотонных энергетических установок /О.В.Корышев, Д.О.Ноготков, Ю.Ю.Протасов и др.; Под ред. Ю.С. Протасова.- М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э.Баумана, 1999.- 640 с.
3. О создании и развитии банка данных по термодинамическим, оптическим и переносным свойствам плазмы («ТОП МГТУ») / К.Э. Бондаренко, О.В.Казаков, О.В.Корышев и др. // Передовые технологии на пороге XXI века: Сб. тезисов докладов Международной конференции, посвященной 145-летию со дня рождения В.Г. Шухова; в 2 ч. - М., 1998.- С. 593-594.
4. Корышев О.В., Шахов А.В. Программный комплекс расчета термодинамических, оптических и транспортных свойств плазмы («ТОП МГТУ») // XXV Гагаринские чтения: Тезисы докладов Международной молодежной научной конференции; в 2 т. - М., 1999.- С. 869-870.

Подписано к печати 28.03.2000

Заказ 40г, объем 10 лл. Тираж 100 экз.

Типография МГТУ им. Н.Э.Баумана.