


ОДЕССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
им. И. И. Мечникова

На правах рукописи

МОХАМЕД ИБРАГИМ 

СЛАБОНЕРАВНОВЕСНАЯ ПЛАЗМА  
С КОНДЕНСИРОВАННОЙ ДИСПЕРСНОЙ ФАЗОЙ  
В СТАТИЧЕСКОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

01.04.14 - Теплофизика и молекулярная физика

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Одесса - 1993

Работа выполнена на кафедре теплофизики  
Одесского государственного университета им. И.И.Мечникова

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук,  
доцент МАРЕНКОВ В.И.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,  
профессор кафедры общей физики ОГУ -  
ШЕВЧУК В.Г.  
доктор технических наук,  
зав.отделом ИИПТ АН Украины  
КРИВИЦКИЙ Е.В.

Ведущая организация: Отделение высокотемпературного преоб-  
разования энергии Института Проблем  
энергосбережения АН Украины  
(г.Киев)

Защита состоится "12" ноября 1993 года в "\_\_\_\_\_" часов на  
заседании Специализированного совета, шифр Д.068.24.03 по физи-  
ко-математическим наукам (физика) в Одесском государственном  
университете им. И.И.Мечникова по адресу: 270057, г.Одесса, ул.  
Щепкина 14, Большая физическая аудитория.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке  
Одесского государственного университета.

Автореферат разослан "11" октября 1993 года.

Ученый секретарь  
Специализированного совета  
к.ф.-м.наук, доцент

*С.М.М.*

МАРГАЦУК С.В.

ЛННБ України ім.В.Стефаніка



00802714 (M)

**Актуальность работы.** Широкое использование гетерогенных плазменных сред, применяемых в современных технологиях, акцентирует внимание исследователей на проблеме описания их равновесных и кинетических свойств. Такие исследования важны для понимания процессов переноса заряда в ЭГД- и МГД-генераторах, для оптимизации работы установок энергетического и технологического назначения, порошковой металлургии и плазменного напыления, улучшения характеристик электрофильтров и плазмохимических реакторов. Особое место здесь занимает плазменный аспект новейших исследований в области "high technology" по получению и модификации свойств фуллеренов (кластеров углерода  $C_{60}$ ) и их соединений в условиях плазменной среды. Лазерная обработка материалов сопряжена с возникновением эрозивного факела при взаимодействии излучения с поверхностью вещества, который является одним из видов плазмы с конденсированной дисперсной фазой (КДФ). Характерно, что для диагностики, управления и воздействия на плазму с КДФ в перечисленных, и многих других областях науки и техники, используют наложение внешних электрического и магнитного полей. Однако до настоящего времени влияние полей "сторонних" зарядов и токов на термоионизационное равновесие гетерогенных плазменных сред изучено недостаточно. Не выяснена связь внешнего электрического поля с масштабом и характером электрических микронеоднородностей плазмы с КДФ, не разработана процедура выделения вкладов атомарных и макрочастиц в ионизацию среды. В целом, ощущается потребность в адекватных физических моделях описывающих термическую ионизацию гетерогенной плазмы, поляризованной внешним полем  $E_0$ . Отсутствие ясности детальных представлений о взаимодействии микрополей и зарядов в неравновесной низкотемпературной плазме (НТП) с КДФ во внешнем поле, препятствует созданию расчетных моделей для исследований ее состояний, представляющих прикладной интерес.

Все это определяет актуальность теоретического исследования неравновесной плазмы с КДФ в статическом электрическом поле, в состояниях близких к равновесному.

**Целью работы** является создание адекватной физической модели термоионизационного равновесия плазмы с конденсированной диспер-

сной фазой, взаимодействующей со слабым внешним электрическим полем. Предполагается развить общий подход к описанию состояний гетерогенной плазмы с током, допускающий обобщение на случай сильных (сравнимых с локальным максвелловским) внешних полей с учетом неидеальности НТП с КДФ. В рамках модели провести компьютерный эксперимент и объяснить наблюдаемую на эксперименте "перезарядку" в полидисперсной КДФ.

#### Научная новизна

1. Впервые многочастичная задача взаимодействия микрополей и зарядов в плазме с КДФ, поляризованной внешним электрическим полем сведена к эффективной одночастичной - с распределением самосогласованного потенциала  $\Phi$  и объемного заряда в усредненной по ансамблю реализаций области экранирования: ячейке  $\Omega_z^2$ , связанной с выделенной конденсированной частицей КЧ. Наличие внешнего электрического поля  $E_0$  учтено в граничных условиях Неймана-Дирихле для максвелловского поля  $E$  на поверхности КЧ и ячейки  $\Omega_z^2$  соответственно. Дано естественное обобщение масштаба разделения зарядов в гомогенной плазме (дебаевского радиуса) на случай НТП с КДФ. Здесь пространственный масштаб разделения зарядов - средний по ансамблю размер областей экранирования  $\Omega_z$ . Найдены общие аналитические выражения для вектора поляризации гетерогенной плазмы, связывающие поляризуемости атомарных частиц, диэлектрические восприимчивости макрочастиц  $\chi_1$  и параметры КДФ с внешним полем и восприимчивостью  $\chi$  НТП с КДФ в целом.
2. Впервые получены общие формулы расчета электростатического вклада в функционал плотности энергии Гельмгольца, учитывающие диполь-дипольное взаимодействие (ДДВ) в слабонеравновесной плазме.
3. Впервые на основе компьютерного эксперимента определена связь и найдены зависимости масштаба электростатических неоднородностей слабонеравновесной плазмы с макрочастицами от напряженности внешнего поля и определяющих параметров плазмы (концентраций микро- и макрочастиц, температуры, элементного состава атомарных-, компонентного и дисперсного состава частиц КДФ)
4. Впервые детально исследован специфический эффект "перезарядки" макрочастиц в гетерогенной плазме поляризованной электрическим полем, указано на его возможные технические применения, проведено сопоставление результатов с имеющимся эмпирическим

ким материалом.

5. Впервые методика построения границ применимости статистической модели ионизации слабонервновесной НТП с КДФ представлена в геометрически-абстрактном виде, обладающем "переместимостью" - возможностью распространения и обобщения на другие физические модели ионизационных процессов в гетерогенных системах. С применением компьютеров найдены "проекции" графической поверхности в пространстве параметров на множество определяющих параметров и построены диаграммы применимости расчетной модели "равновесной плазмы с макрочастицами в электрическом поле.

**Практическая ценность.** Полученные во 2-й главе общие формулы для расчета вектора поляризации слабонервновесной НТП с КДФ во внешнем электрическом поле и электростатической части плотности свободной энергии Гельмгольца могут быть использованы для расчета диэлектрической восприимчивости гетерогенных плазменных сред с полидисперсными макрообъединениями.

Аналитическое решение для самосогласованного потенциала в поляризованной плазме с КДФ, найденное в главе 3, определяет микроструктуру электростатических неоднородностей в объеме плазмы и могут быть применены для оптимизации характеристик рабочих плазменных сред.

Результаты 4-й главы с анализом "перезарядки" макрочастиц могут быть применены для разработки способов сепарации и выделения монодисперсных фракций в ансамбле КДФ по тому или иному признаку (размеру, работе выхода и т.п.).

**Автор защищает следующие положения работы:**

1. Анализ физических процессов в слабонервновесной плазме с КДФ восстанавливающих электронейтральность в микрообъемах и обобщение понятия пространственного масштаба разделения зарядов на случай поляризованной внешним полем НТП с КДФ. Здесь выделим: а. переход от мгновенных электронейтральных областей в плазме к эффективной квазинейтральной ячейке; б. отражение основных электрон-ионных процессов посредством установления связи между локальными и интегральными средними в уравнениях термоионизации; в. аналитическое решение и физическую модель ионизации, систему термоионизационных уравнений, ее аналитическое решение и выделение области его существования для слабоионизованной НТП с КДФ во внешнем поле.

2. Представления об изменениях, вносимых внешним электрическим полем в межфазный обмен электрическим зарядом и структуру электростатических неоднородностей на микрофизическом уровне. Расчет поляризационных вкладов атомарных и макрочастиц в локальное максвелловское поле в ячейке электронейтральности для  $|\mathbf{E}_0| < |\langle \mathbf{E}_{loc} \rangle|$ .
3. Метод расчета и общие формулы, полученные на его основе для электростатической части свободной энергии Гельмгольца слабонравновесной гетерогенной плазмы, учитывающие локальные неоднородности и поляризацию во внешнем электрическом поле (существенно электростатическая и диполь-дипольная части функционала Гельмгольца).
4. Постановку и решение задачи о распределении самосогласованного потенциала в системе координат Лагранжа выделенного макрозаряд, в которой наличие неравновесности, поляризации и максвелловского поля в объеме гетерогенной плазмы учтено в граничных условиях Неймана-Дирихле для уравнения Пуассона-Больцмана, записанного для ячейки экранирования.
5. Численную модель и алгоритм ее реализации на компьютерах IBM/AT по расчету электрофизических параметров (электронной и ионной концентраций, зарядового состава КДФ) неравновесной гетерогенной плазмы, поляризованной постоянным внешним электрическим полем.
6. Общую физическую модель процессов восстанавливающих квалинейтральность в микрообъемах слабонравновесной гетерогенной плазмы с полидисперсным спектром частиц КДФ и легкоионизирующимися атомами в приближении "желе" для тяжелой компоненты.
7. Теоретические представления, физическую модель и ее алгоритмизированный математический аналог процесса "перезарядки" макрочастиц в слабонравновесной гетерогенной плазме, поляризованной электрическим полем. Результаты модельных расчетов радиуса "перезарядки" для конкретных видов НТП с КДФ в условиях внешнего поля.
8. Исследование границ применимости статистической модели термoионизации поляризованной слабонравновесной НТП с КДФ и выделение на их основе интервалов определяющих параметров корректного описания ее состояний.

### **Апробация результатов.**

Результаты работы докладывались на всесоюзном семинаре "Проблемы преобразования энергии и рационального использования органического топлива в энергетике" (г. Киев, 1991), IV научной школе "Физика импульсных воздействий на конденсированные среды" (ИИПТ АН Украины, г. Николаев, 1993г.), "Шестнадцатой конференции стран СНГ по вопросам испарения, горения и газовой динамики дисперсных систем" (г.Одесса, 1993 г.), на научных семинарах кафедры теплофизики и кафедры теоретической физики Одесского государственного университета.

**Публикации.** Основные результаты диссертации изложены в четырех печатных работах.

**Структура диссертации.** Работа состоит из введения, 4-х глав, заключения, выводов и приложений. Содержит 125 страниц основного текста, 10 рисунков, 2 таблиц, 105 наименований цитированных источников литературы и 8 приложений.

### **СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

Во введении обоснована актуальность темы исследований. Вниманию уделено главным моментам проблемы построения адекватных физических моделей ионизации неравновесной гетерогенной плазмы, взаимодействующей с внешним электрическим полем. Формулируются цели и задачи работы.

В первой главе рассмотрены состояния термоионизационного равновесия НПП с КДФ, реализующиеся при воздействии на нее внешнего статического электрического поля. Как показывает эксперимент, в отсутствие внешнего поля (в термоионизационном равновесии), и в постоянном поле сторонних электрических зарядов (в стационарном случае) - гетерогенная плазма обладает свойством квазинейтральности: сохранением электронейтральности (с точностью до флуктуаций) в объемах и во временах малых по сравнению с объемом системы и временем наблюдения. Квазинейтральность НПП с КДФ обусловлена наличием существенной корреляции в движении атомарных и макрочарядов за счет электромагнитного взаимодействия между ними. Для чисто газовых систем нарушения электрической нейтральности реализуются в областях сравнимых с дебаевской длиной

$$r_D = \left[ 4\pi e^2 \sum_j n_j z_j^2 / kT \right]^{-1/2} \quad (1)$$

$n_j$  - зарядовое число ионов сорта  $j$ ;  $n_j$  - их концентрация;  $T$  - температура. Однако  $r_D$ , определяя пространственный масштаб разделения зарядов в гомогенной плазме, не может служить таковым для плазмы с КДФ, поскольку собственный размер заряженных макровключений (частиц КДФ) часто на порядки превышает величину (1). Естественным обобщением радиуса Дебая на случай гетерогенной плазмы является средний по ансамблю реализаций (в равновесии по ансамблю Гиббса) размер электронейтральных областей  $\Omega_c$ , создаваемых мгновенными конфигурациями зарядов. Таким образом, объем НТП с КДФ в каждый момент времени разбивается многосвязной поверхностью  $\Pi$  на электронейтральные области - ячейки  $\Omega_c$ . Усреднив по ансамблю реализаций в Лагранжевой системе координат выделенной конденсированной частицы (КЧ) ее зарядовое окружение, приходим к эффективной задаче взаимодействия микрополей и зарядов в усредненной ячейке  $\Omega_c$ . Размер  $\Omega_c$  и будет определять масштаб электростатических неоднородностей гетерогенной плазмы. Причем он должен быть таким, чтобы электростатические взаимодействия привнесли в плотность функционала свободной энергии Гельмгольца минимальный вклад. Для слабоионизованной плазмы получена общая замкнутая система термоионизационных уравнений, в которую входят [1]:

- уравнение Саха для локальных концентраций атомарных частиц на границе ячейки  $\Omega_c$ ;
- закон сохранения легкоионизирующихся атомов для ячейки в целом, с учетом их распределения в самосогласованном поле;
- модифицированное уравнение Ричардсона-Дешмана зарядового равновесия выделенной КЧ;
- решен э уравнения Пуассона-Больцмана, устанавливающее связь самосогласованного потенциала с плотностью электрон-ионной атмосферы на границе области  $\Omega_c$ ;

Показано, что в безразмерных переменных:  $\tilde{r} = (n_{e0} + n_{i0}) / k_{e0}$ ,  $\alpha = (n_{e0} - n_{i0}) / (n_{e0} + n_{i0})$  она редуцируется и переходит в систему двух трансцендентных уравнений, содержащих  $\tilde{r}$  и  $\alpha$ . Здесь  $n_{e0}$ ,  $n_{i0}$  - локальные концентрации электронов и ионов на границе  $\Omega_c$ ,  $k_{e0}$  - локальная константа Саха. В отсутствие внешнего поля НТП с КДФ изотропна, ячейка  $\Omega_c$  сферически-симметрична, а ее размер -  $\alpha/2$

такой, что электростатический вклад в функционал Гельмгольца минимален. Безразмерный, перенормированный относительно поверхности  $\Pi$  потенциал в ячейке

$$\Phi(|\vec{r}|) = \frac{\alpha}{2x} \left\{ x \frac{\alpha}{2} \operatorname{ch} \left[ x \left( \frac{\alpha}{2} - r \right) \right] - \operatorname{sh} \left[ x \left( \frac{\alpha}{2} - r \right) \right] - \alpha r \right\}, \quad (2)$$

где  $x = (4\pi e^2 p / kT)^{1/2}$  - обратная дебаевская длина атомарных зарядов;  $r$  - расстояние. Найден для случая слабонеидеальной плазмы при  $E_0 = 0$ .

Подробный анализ математической модели и областей существования решения системы термоионизационных уравнений завершает главу.

Во второй главе подробно анализируются физические процессы сопровождающие протекание тока и возникновение поляризации в объеме гетерогенной плазмы, исходящейся в статическом электрическом поле. Отмечено, что каналы термической ионизации газа и частиц в слабонеравновесной НТП с КДФ прежние, однако появление максвелловского поля в объеме, обусловленное поляризацией плазмы, меняет значения локальных констант Саха для газовых частиц и приводит к перераспределению плотности электрон-ионных атмосфер КЧ. Это сопряжено с необходимостью явного включения в математическую модель термоионизации газа и КДФ нескомпенсированного значения поля Максвелла  $\vec{E}$  на поверхности  $\Pi$  (внешней границе ячейки  $\Omega_g^*$ ) и определения связи  $\vec{E}$  с напряженностью внешнего поля  $E_0$ . То есть, выдвигает на передний план задачу определения вектора поляризации

$$\vec{P} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \iint_{\Omega_g} \left[ \frac{1}{kT} \int_0^t \rho(\vec{r}, u) \vec{r} du \right] d\vec{r} = \frac{\langle \vec{P}_{\Omega_g} \rangle_t}{\Omega_g^*} \quad (3)$$

в объеме гетерогенной плазмы. Здесь  $\Omega_g^*$  - объем мгновенной ячейки экранирования,  $\rho(\vec{r}, u)$  - мгновенная плотность заряда в точках  $\vec{r}$ ; скобки  $\langle \dots \rangle_t$  - означают усреднение по времени.

Оценка напряженности локального микрополя  $|\vec{E}_{loc}|$  вблизи макрочастиц КДФ, что для характерных значений параметров КЧ в приложениях ( $r_p \sim 10^{-3} \text{ см}$ ,  $x = 10$ ) дает  $|\langle E_{loc} \rangle| \ll ze^2/r^2$  составляет величину  $\sim 4,8 \cdot 10^3$  единиц напряженности электрического поля СГСЕ, которая во многих случаях на порядки превышает внешние поля. Это обосновывает сферическое приближение для статистической модели ячеек слабонеравновесной плазмы. В его рамках форма усредненных областей остается сферической, как и в рамках модели

ячеек для равновесной плазмы, однако граничные условия для уравнения Пуассона-Больцмана модифицируются с учетом максвелловского поля в объеме НТП с КДФ. На границе  $\Omega_{\Sigma}^{\pm} - S_{\Omega}$  и поверхности выделения КЧ -  $S_p$  напряженность локального максвелловского поля определяется градиентом самосогласованного потенциала  $\Phi$ . На поверхности ячейки  $S_{\Omega}$  поле Максвелла совпадает с усредненным по объему, т.е.

$$\vec{E} = \vec{E}_0 - \frac{4}{3} \pi \vec{P}, \quad (4)$$

где  $\vec{P}$  определено (3), а для локального поля на поверхности  $S_p$

$$\vec{E}_p = \vec{E} - \frac{4}{3} \vec{P}_p \quad (5)$$

$\vec{P}_p$  - усредненный вектор поляризации внутри КЧ. В формулах (4) и (5) учтено, что ячейка и КЧ сферически симметричны. Связь параметров, характеризующих микроструктуру поляризованной гетерогенной плазмы с вектором (3) устанавливает в лагранжевых координатах КЧ сорта "1", формула полученная в [2].

$$\vec{P} = \frac{1}{\Omega_{\Sigma}^{\pm}} \left\{ \int_{\Omega_{\Sigma}^{\pm} \setminus V_p} \left[ \sum_j \alpha_j n_j(\vec{r}) + \sum_l \chi_{pl} \int_{r_{pn}}^{r_{pr}} f_l(r_p) dr_p \right] \times \right. \\ \left. \times \vec{E}_{loc}(\vec{r}) d\vec{r} + \chi_{p1} V_{p1} \langle \vec{E}_{loc} \rangle_{V_1} \right\} \quad (6)$$

Здесь  $j$  - нумерует атомарные частицы;  $l$  - дисперсные;  $\alpha_j$  - поляризуемости частиц газовой фазы;  $\chi_{pl}$  - диэлектрическая восприимчивость вещества КЧ сорта  $l$ ;  $f_l(r_p)$  - функция распределения  $l$ -й компоненты КДФ по размерам;  $\vec{E}_{loc}(\vec{r}) = -\vec{\nabla}\Phi(\vec{r})$  - локальное электрическое поле в точке  $\vec{r}$ . Формулы (3-6) используются далее при расчете граничных условий Неймана для уравнения Пуассона-Больцмана.

Поляризация неравновесной НТП с КДФ в микробыках приводит также к появлению в функционале плотности свободной энергии плазмы слагаемого, определяемого диполь-дипольным взаимодействием. Выраженный через локальное электрическое поле, поляризуемости частиц газа, диэлектрическую восприимчивость макрочастиц и дисперсные характеристики ансамбля КДФ вклад ДДВ в энергию Гельмгольца отдельной ячейки представлен в виде

$$E_{\Omega}^D = \frac{1}{2} \left\{ \int_{\Omega_{\Sigma}^{\pm} \setminus V_p} \left[ \sum_j \alpha_j n_j(\vec{r}) + \sum_l \chi_{pl} \int_{r_{pn}}^{r_{pr}} f_l(r_p) dr_p \right] \times \right. \\ \left. \int_{r_{pn}}^{r_{pr}} f_l(r_p) dr_p \right\}$$

$$\times E_{loc}^2(\vec{r})d\vec{r} + \left\{ \chi_{p1} E_{loc}^2(\vec{r})d\vec{r} \right\} \quad (7)$$

В формуле (7) использованы те же обозначения, что и в (6). Соотношения (3-7) положены в основу расчетной Физической модели и пакете программ ее численной реализации на ЭВМ ИВРА.

Третья глава посвящена расчету самосогласованного потенциала и локальных электрических полей в поляризованной плазме с макро-частицами. В качестве объекта исследования выбрана модельная система, состоящая из буферного газа, легкоионизирующихся атомов одного сорта и монодисперсного ансамбля частиц КДФ, которая помещена во внешнее статическое электрическое поле с напряженностью  $|E_0| < |E_{loc}|$ . Как показывает эксперимент, три температурах  $T = 1000-5000K$ , используемых в приложениях, ионизация НП с КДФ не превышает по электронной компоненте  $n_e < 10^{18} m^{-3}$ , что позволяет отнести ее к слабонравновесным системам, в которых потенциальная энергия межчастичного взаимодействия в среднем не превышает  $kT$ . Декартова и связанная с ней сферическая системы координат выбираются, так, чтобы ось  $OZ$  и полярная ось в координатах  $(r, \varphi, \theta)$  совпадали с направлением внешнего поля  $E_0$  (рис.1). Вследствие цилиндрической симметрии задачи, линеаризованное

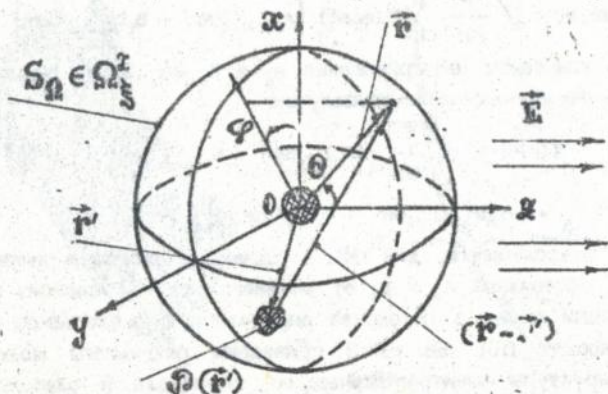


Рис.1. Базовые OXYZ и связанные с ней сферические координаты, используемые в расчетах вкладов поляризации в микрополя.

уравнение Пуассона-Больцмана для безразмерного, перенормированного относительно "экватора" ячейки  $\Omega_c^*$  потенциала  $\Phi(r, \theta)$  запишем [3]

$$\Delta_r \Phi(r, \theta) + \Delta_\theta \Phi(r, \theta) = \alpha^2 [\Phi(r, \theta) + \alpha] \quad (8)$$

$\alpha^2$  - квадрат обратного радиуса Дебая для электронов и ионов, локализованных вблизи "экватора" ячейки;  $\alpha = (n_{e0} - n_{i0}) / (n_{e0} + n_{i0})$ . Воспользовавшись формулами (4-5), граничные условия для уравнения (8), запишем

$$\frac{\partial \Phi(r_p, \theta)}{\partial r} = - \frac{ze^2}{r_p^2 kT} + \frac{e}{kT} E_p \cos \theta \quad (9)$$

$$\frac{\partial \Phi(\alpha/2, \theta)}{\partial r} = \frac{e}{kT} |E| \cos \theta; \quad \Phi\left(\frac{\alpha}{2}, \frac{\pi}{2}\right) = 0.$$

Условие Дирихле (последнее уравнение в (9)) определяет нормировку самосогласованного потенциала  $\Phi(r, \theta)$  относительно "экватора" ячейки  $\Omega_c^*$  (рис. 1).

Преобразовав (8) к переменной  $y(\alpha r, \theta) = \Phi(\alpha r, \theta) + \alpha$ , получим его общее решение в мультипликативном виде относительно полиномов Лежандра и модифицированных функций Бесселя полуцелого порядка [3]

$$y(\alpha r, \theta) = \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha r}} \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \theta) \left[ A_l I_{l+1/2}(\alpha r) + B_l I_{l-1/2}(\alpha r) \right]$$

Определив константы интегрирования  $A_l$  и  $B_l$  из (9) и, возвращаясь к функции  $\Phi(r, \theta)$ , окончательно получим

$$\Phi(r, \theta) = \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha r}} \left\{ \left[ A_0 I_{1/2}(\alpha r) + B_0 I_{-1/2}(\alpha r) \right] + \right. \\ \left. + \cos \theta \left[ A_1 I_{3/2}(\alpha r) + B_1 I_{-3/2}(\alpha r) \right] \right\} - \alpha \quad (10)$$

Остальные коэффициенты, для  $l \geq 2$ , в случае сферической ячейки равны нулю. Постоянные  $A_0$  и  $B_0$  от внешнего поля не зависят и, полярizationsный вклад в потенциал определяют 2- слагаемое в фигурных скобках (10). На рис.2 приведены результаты модельного расчета структуры электростатического потенциала в слабонеровновесной НП с КДФ, имеющей параметры:  $T = 2800K$ ;  $n_p = 10^{16} \text{ м}^{-3}$ ;  $n_p = 10^{-7} \text{ м}$ ;  $p = (n_{e0} - n_{i0}) = 10^{20} \text{ м}^{-3}$ ;  $\alpha = 0,6$ ;  $w = 4,7 \text{ эВ}$  по прог-

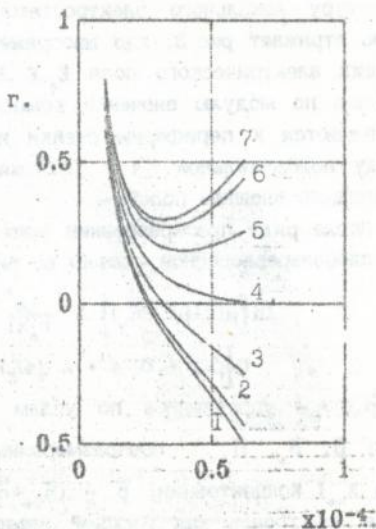
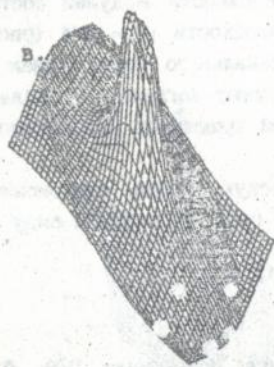
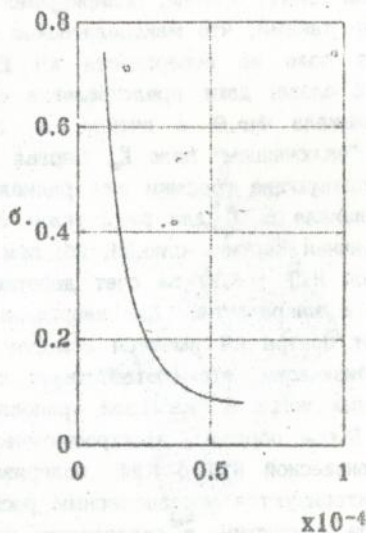
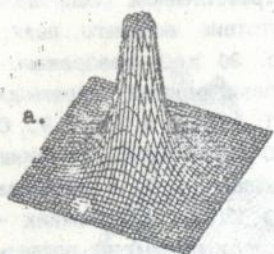


Рис. 2. Распределение сам-согласованного потенциала в ячейке электронейтральности  $\Omega_{\Sigma}^{\Sigma}$  гетерогенной плазмы, поляризованной внешним полем  $E_0$ .

рамме IBRAY. Причем, поляризуемости частиц и внешнее поле  $E_0$  выбраны: такими, что максвелловское поле  $E = 0,2ze/\gamma_p^2$  и деполаризующее поле на поверхности КЧ  $E_p = 0,06ze/\gamma_p^2$ . Поверхности (на рис.2 слева) дают представление о пространственном распределении потенциала  $\Phi(\gamma, \theta)$  в ячейке: а. в отсутствие внешнего поля; в. при "включенном" поле  $E_0$ . Справа на рис. 2б и 2г изображены соответствующие графики для радиальных зависимостей безразмерного потенциала в  $\Omega_z^2$  для ряда углов  $\theta = \pi/6(j-1)$ ,  $j = 1, 2, \dots, 7$ . Симметричная картина (рис.2а, 2б) при  $E = 0$  искажается, для неравновесной НТП с КДФ за счет действия внешнего поля и поляризации газа и макрочастиц. Для направлений  $\theta \geq 120$  на расстояниях  $\sim 2+3 \gamma_p$  от центра КЧ имеются области локального минимума потенциала  $\Phi$ . Физически, это соответствует повышенной концентрации положительных ионов в указанной приповерхностной области положительной КЧ. Таким образом, электростатические микронеоднородности слабонеравновесной НТП с КДФ, поляризованной полем внешних зарядов, характеризуются неравномерным распределением плотности электронной атмосферы в окрестности частиц КДФ, что может быть использовано в эксперименте в целях диагностики состояний плазмы. Структуру локального электростатического поля в ячейке качественно отражает рис.3, где изображены поверхности модулей составляющих электрического поля  $E_x, E_y, E_z$  в плоскости  $\varphi = \pi/4$  (рис.1). Большие по модулю значения компонент локального поля вблизи КЧ уменьшаются к периферии ячейки и достигают infimum'a в области между положительной КЧ и "положительной пластиной конденсатора, создающего внешнее поле".

После ряда преобразований математическую модель термоионизации слабонеравновесной плазмы во внешнем поле приведем к виду

$$\ln \left[ \tilde{p}(2-\delta)/(2\tilde{n}_A) \right] + \frac{ze^2}{\gamma_p kT} + \langle \Phi_p(\tilde{p}, \delta) \rangle_\theta = 0 \quad (11)$$

$$\delta \left[ \tilde{p}(2-\delta)/4 + z/(p\Omega_z^2) + \delta \right] - \tilde{n}_A/\tilde{p} = 0$$

$\langle \Phi_p(\tilde{p}, \delta) \rangle_\theta$  - усредненное по углам значение потенциала (10);  $\delta = (1-\alpha)$ ;  $\tilde{p}$ ,  $\tilde{n}_A$ ,  $\tilde{n}_A$  - безразмерные (нормированные на константу Саха  $k_{so}$ ) концентрации;  $\tilde{p} = (\tilde{n}_{e0} + \tilde{n}_{i0})$ ;  $\tilde{n}_A$  - равновесная концентрация электронов над плоской незаряженной поверхностью вещества КЧ;  $\tilde{n}_A$  - исходная концентрация легкоионизирующихся атомов. Уравнение для зарядового числа  $z$  макрочастицы получено в аналитическом виде

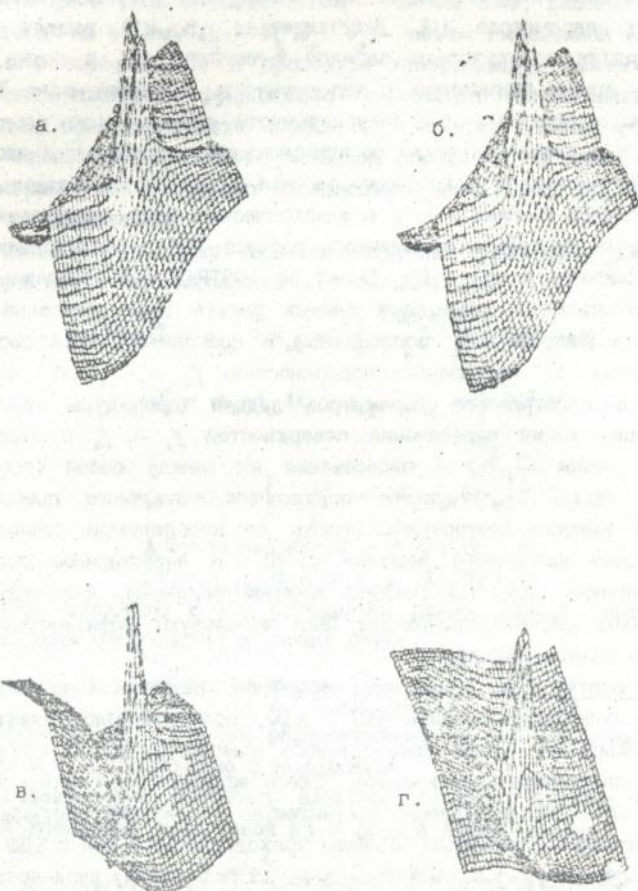


Рис. 3. Компоненты  $E_x$ ,  $E_y$ ,  $E_z$  локального максимума для всего поля в объеме ячейки а., б., в. соответственно, и модуля его напряженности  $E = \sqrt{E_x^2 + E_y^2 + E_z^2}$ .

$$z = \alpha \frac{kT}{\alpha e} \left\{ x \left[ \frac{\alpha}{2} - r_p \right] \operatorname{ch} \left[ x \left[ \frac{\alpha}{2} - r_p \right] \right] - \left[ 1 - x^2 \frac{\alpha}{2} \right] \operatorname{sh} \left[ x \left[ \frac{\alpha}{2} - r_p \right] \right] \right\}. \quad (12)$$

(12) с данными (11) может рассматриваться как уравнение состояния слабонеровновесной НТП с КДФ, записанное на языке электрофизических параметров [1]. Действительно, в (12) входят объем, концентрации молекулярных зарядов и температура, а также (неявно) все другие параметры ( напряженность внешнего поля  $E_0$ ; потенциалы ионизации -  $I_0$ ; поляризуемости атомов -  $\alpha_j$ ; работа выхода -  $W$  и диэлектрическая восприимчивость -  $\chi$  вещества частиц).

Для численной реализации расчета конкретного состава слабонеровновесной плазмы с КДФ в электрическом поле разработан пакет прикладных программ плазменного расчета IBRA, реализующий численные расчеты в среде ПК IBM/AT на ФОРТРАН,е-77. Рисунки 2 и 3 являются примером выходных данных пакета IBRA. Основные этапы алгоритма решения (11), воплощенные в программах IBRA состоят в следующем: 1. построение поверхностей  $f_1 = f_1(\vec{r}, \theta)$  и  $f_2 = f_2(\vec{r}, \theta)$  в пространстве параметров задачи (процедуры IBRAV); 2. вычисление линий пересечения поверхностей  $f_1$  и  $f_2$  с плоскостью  $(\vec{r}, \theta)$  и точки  $(\vec{r}_0, \theta_0)$  - пересечения их между собой (процедуры WYNPM, PELT); 3. уточнение полученного начального приближения методом Ньютона-Канторовича вплоть до необходимой точности; 4. подстановка найденного решения  $(\vec{r}^*, \theta^*)$  в необходимое соотношение, например (10), для расчета искомой величины. Для визуализации данных расчета программы IBRA используют возможности стандартного пакета MATLAV.

Четвертая глава содержит обобщение физической модели процесса в слабонеровновесной НТП с КДФ, поляризованной электрическим полем, на случай произвольного компонентного и дисперсного состава подсистемы макрочастиц. Здесь эффективная ячейка экранирования  $\Omega_e^*$  после усреднения по ансамблю реализаций системы имеет объем равный  $\xi$  удельным объемам приходящимся в НТП с КДФ на одну макрочастицу, т.е. масштаб электростатических неоднородностей в системе (размер ячейки)

$$\frac{\alpha}{2} = \left[ \frac{3}{4\pi} \xi / \int_{r_p}^{\Gamma} f(r_p) dr_p \right]^{1/3}. \quad (13)$$

Параметр  $\xi$  имеет смысл среднего числа макрочастиц, эффективно

участвующих во взаимной экранировке в неравновесной плазме с КДФ, и является аналогом координационного числа в теории жидкости. Наличие вклада других  $(\xi-1)$  макрочастиц в объемный заряд ячейки  $\Omega'_z$  учитывается в приближении "желе" - компенсирующего зарядового фона тяжелой подсистемы - частиц КДФ, равномерно "размазанного" по объему  $\Omega'_z = \Omega'_z \nu_p$ ,  $\nu_p$  - объем выделенной КЧ. Масштаб  $(\alpha/2)$  определяется в процедуре минимизации электростатической части плотности функционала Гельмгольца гетерогенной плазмы с учетом поляризационного вклада (7). Имеется возможность только лишь численной реализации указанной процедуры на ЭВМ. Комплекс подпрограмм IBRA содержит независимую часть INNES [4], реализующую эти вычисления.

Замкнутую систему термоионизационных уравнений, для неравновесной НТП с полидисперсной КДФ запишем [4]:

$$\frac{n_{e0} \cdot n_{i0}}{n_a} = K_{e0}, \quad K_{e0} = 2 \left( \frac{2\pi m_e kT}{h^2} \right)^{3/2} \exp(I_a/kT).$$

$$n_A \cdot \Omega'_z = (n_a + n_{i0}) \Omega'_z + I_{Iz}, \quad I_{Iz} = \int_{\Omega'_z} \Phi(\vec{r}) d\vec{r}$$

$$n_{e0} = n_a \exp \left[ -\frac{z\phi}{r_p kT} - \langle \Phi_p(r_p, \theta) \rangle_{\Theta} \right] \quad (14)$$

$$\Delta_r \Phi(r, \theta) + \Delta_{\theta} \Phi(r, \theta) = -z^2 \Phi(r, \theta) + \alpha$$

$$\partial F_z(I, n_A, I_a, \alpha, n_p, r_p, f_l, \chi_{pl}, E_0) / \partial \xi = 0$$

Величины, входящие в (14) определены ранее, однако переменная с учетом фона макрочастиц в ячейке будет

$$\alpha = \frac{n_{e0} - n_{i0}}{n_a + n_{i0}} - \left[ \sum_j z_j \Omega'_z \right] / (n_{e0} + n_{i0}) = \alpha_0 - \alpha_1 \quad (15)$$

Суммирование по  $j$  в (15) распространено на все макрочастицы попадающие в  $\Omega'_z$ , совместно с выделенной.

Безразмерную плотность электростатической энергии электронной атмосферы выделенной КЧ и фона в ячейке найдем

$$I_1 = I_{Iz} / \Omega'_z = \alpha_0 \left\{ \frac{4\pi^2}{kT} [x \operatorname{sh} x - (1-x^2) \frac{\alpha}{2} r_p \operatorname{sh} x] / (\alpha^2 \Omega'_z) - \frac{\partial \Phi}{kT} \right\} /$$

$$\left\{ \alpha_1 [x \operatorname{sh} x - (1-x^2) \frac{\alpha}{2} r_p \operatorname{sh} x] + \frac{\partial \Phi}{kT} \right\} = \alpha_0 S(x),$$

$$x = \alpha \left[ \frac{\alpha}{2} - r \right] = \alpha \frac{r}{2} (1-\beta)$$

$$S(x) = S(x) = [\xi \cdot \eta / (\eta - 1) - 1]^{-1}$$

$$\eta(x) = \frac{3(1-\beta)^2 \cdot [x \operatorname{ch} x - (1-x^2) \frac{\alpha}{2} \Gamma_p \operatorname{sh} x]}{(1+\beta+\beta^2) x^2} \quad (16)$$

Зависимость электростатической части свободной энергии Гельмгольца от параметров неравновесной НТП с КДФ определяется посредством функции  $S = S(x)$ . Как видно из (16)  $S(x) = S[\eta(x), \xi]$  дробно-линейная функция параметров  $\eta$  и  $\xi$  и, в зависимости от их величины, может принимать значения противоположных знаков. Каждое изменение знака  $S(\eta, \xi)$  с необходимостью, для сохранения устойчивости плазмы, сопряжено с соответствующим изменением знака параметра  $\alpha$ , т.е. знака зарядового числа КЧ -  $z$ . Действительно, устойчивые состояния гетерогенной неравновесной плазмы реализуются в случае, когда заряд окружения и выделенной КЧ в ячейке противоположны, что физически соответствует притяжению. Формулы (16) служат основой для выделения областей униполярной зарядки частиц КДФ в гетерогенной плазме.

Неоднородность состава КДФ в компьютерном эксперименте учитывается преобразованием  $\tilde{\alpha}_i = \zeta \alpha_i$ ;  $\tilde{\eta} = \zeta \eta$ , где  $\zeta$  определяет относительный вклад "фона макрозарядов" в суммарный электрический заряд атмосферы пробной КЧ в ячейке ( $|\zeta| \leq 1$ ). Для  $\delta$ -образной функции распределения КДФ по размерам  $\zeta = 1$ , функция  $S = S(\tilde{\eta}, \xi)$  при  $\xi > 1$  во всей области изменения параметров положительна и знака не меняет. И только для  $\xi < 1$  (случай уединенных макрозарядов в газовой фазе) "перезарядка" КЧ может быть реализована за счет повышения ионизации газовой компоненты. То есть, "перезарядку" монодисперсной КДФ можно ожидать в расширяющейся плазменной струе, в которой по мере расширения повышается ионизация газа. Действие максвелловского поля в объеме НТП с КДФ понижает потенциалы ионизации газовых компонент, и указанный процесс можно контролировать наложением внешнего электрического поля.

В общем случае "перезарядка" макрочастиц в неравновесной НТП с КДФ лимитируется поведением функции

$$S(\xi, \tilde{\eta}) = \frac{1}{\xi \tilde{\eta} / (\tilde{\eta} - 1) - 1} \quad (17)$$

на полуплоскости ( $\xi \geq 0$ ,  $|\tilde{\eta}| < 1$ ). На рис.4 изображен общий вид поверхности  $S$ , полученной на основе (17) с помощью подпрограммы SKSY пакета IBRA. Обращает на себя внимание наличие разрыва 1-го рода функции  $S$  на линии  $\tilde{\eta}^* = 1/(1-\xi^*)$ . По обе стороны линии  $S$  принимает значения разных знаков. Причем для критических параметров плазмы  $\tilde{p}^*$  и  $\delta^*$ , таких что:

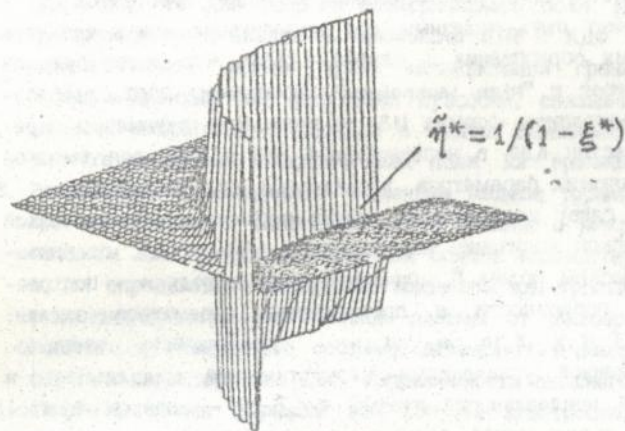


Рис.4. Поверхность "перезарядки"  $S = S(\xi, \tilde{\eta})$  в координатах  $(\xi, \tilde{\eta})$ .  $\tilde{\eta}^* = 1/(1 - \xi^*)$  - линия "перезарядки" частиц КДФ.

$$\begin{aligned} \xi(\tilde{r}^*, 0) &= \xi^* \\ \tilde{\eta}(\tilde{r}^*, 0) &= \tilde{\eta}^* \end{aligned} \quad (18)$$

реализуется "перезарядка" - малые изменения определяющих параметров плазмы приводят к существенному изменению модуля заряда КЧ -  $z$  и его полярности. В области (18) плазма неустойчива. Физической причиной неустойчивости и "перезарядки" является перестройка электрон-ионной атмосферы КЧ в направлении состояний с наиболее низкими значениями свободной энергии Гельмгольца. Полярность КЧ, структура микрополей и зарядового окружения в ее окрестности соответствуют минимуму функционала Гельмгольца.

Развитые представления объясняют ряд экспериментальных фактов: наличие у однородных частиц КДФ, различающихся размером, зарядами разной полярности, бимодальность суомикронной фракции окислов, полученной вследствие парогазовой конденсации в плазме продуктов сгорания металлизированных топлив и др. Анализ влияния внешнего поля  $E_0$  на "перезарядку" показывает, что малые его изменения вблизи линии  $\tilde{\eta}^* = \tilde{\eta}^*(\xi)$  приводят к существенным изменениям заряда КЧ. Указывается на возможность использования этого факта для разработки технологических схем сепарации КДФ по раз-

меру КЧ или другому параметру. Так, создание в плазменной среде условий соответствующих положительной зарядке кластеров  $C_{oo}$  - Фулленеренов, может быть полезным для имплантации ионов вовнутрь  $C_{oo}$  на стадии их образования в плазме с КДФ, что имеет большой практический интерес в "high technology" Программы RSOZ, разработанные с использованием формул (13-18) вычисляют параметры перезарядки макрочастиц КДФ в неравновесной НТП с КДФ для широкой области определяющих параметров, характерных для приложений.

Завершает главу исследование границ применимости физической модели термической ионизации неравновесной НТП с КДФ, поляризованной электрическим полем  $E_0$ . Основная идея методики - построение граничной поверхности в пространстве параметров задачи:  $(T, n_A, I_a, n_p, \Gamma_p, W, f_1, \alpha_1, \chi_{ip}, E_0, [n_{oo}, n_{io}, z_i])$ , являющейся гиперповерхностью, заданной уравнениями математической модели (14), и условием слабой неидеальности плазмы  $\Phi(\xi, \tilde{r}, \theta) = \text{const} < 1$ . В численной модели определенное значение const задает относительную точность расчета, сопряженную с физическим ограничением модели - малостью потенциальной энергии атомарных зарядов НТП с КДФ в самосогласованном поле  $\Phi$ , по сравнению с тепловой энергией кТ. Пересечение гиперповерхности с соответствующей плоскостью определяющих параметров дает диаграммы применимости модели ионизации плазмы с КДФ, поляризованной полем  $E_0$ .

В заключении акцентируется внимание на главных моментах описания неравновесной НТП с КДФ в электрическом поле  $E_0$ . Обсуждаются возможности обобщения статистической модели на случай сильных внешних полей в неидеальной НТП с КДФ. Отмечена общность развитых представлений об эффективных областях экранирования  $\Omega_V^{\pm}$  применительно к физическому моделированию неравновесных гетерогенных плазменных сред.

#### ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Впервые для неравновесной плазмы с КДФ, поляризованной внешним электрическим полем  $E_0$ , предложено общее статистическое решение проблемы описания взаимодействия микрополей и зарядов в гетерогенной кулоновской системе, сводящее многочастичную задачу к эффективной одночастичной - о зарядовом равновесии выделенной КЧ в усредненной по ансамблю реализаций области экранирования - ячейке  $\Omega_V^{\pm}$ . Уточнено понятие квазинейтральности гетерогенной плазмы, найден масштаб разделения зарядов,

который равен среднему размеру ячейки экранирования.

2. Показано, что для слабого электрического поля  $|\vec{E}_0| < |\langle \vec{r}_{loc} \rangle|$  поляризационные вклады в ионизацию НТП с КДФ вычисляются в статистической модели путем модификации граничных условий Неймана-Дирихле для уравнения Пуассона, связывающего распределение микрополей и зарядов в ячейке экранирования на основе расчета локального электрического поля на границах  $\Omega_c^*$ .
3. Разработаны физическая и численные модели термической ионизации неравновесной слабонеидеальной плазмы с макрочастицами во внешнем электрическом поле. На основе компьютерного эксперимента определены зависимости масштаба электростатических микро неоднородностей гетерогенной плазмы от температуры, компонентного и элементного составов атомарных и макрочастиц, дисперсных характеристик КДФ, напряженности внешнего поля.
4. Получены общие формулы для расчета электростатической части функционала свободной энергии Гельмгольца НТП с КДФ, поляризованной внешним электрическим полем. Найдено аналитическое выражение для вектора поляризации гетерогенной плазмы, связывающее поляризуемости атомарных частиц, диэлектрические восприимчивости  $\chi$  макрочастиц, поле  $\vec{E}_0$  и диэлектрическую восприимчивость  $\chi$  плазмы в целом. Явно выделены вклады макро- и молекулярных частиц в объемный вектор поляризации.
5. Определена структура локального электрического поля вблизи макрочарядов, взаимодействующих с полем  $\vec{E}_0$ . Показано, что общее решение для перенормированного самосогласованного потенциала  $\Phi$  в неравновесной НТП с КДФ определяется частной суммой ряда, члены которого мультипликативным образом сочетают полиномы Лежандра и функции Бесселя полуцелого порядка.
6. Построена общая физическая модель процессов восстанавливающих квазинейтральность в микрообъемах НТП с полидисперсной КДФ и легкоионизирующимися присадками, помещенной во внешнее электрическое поле. В приближении "желе" для тяжелой компоненты подробно проанализирован обнаруженный эффект "перезарядки" макрочастиц. Найдены его экспериментальные подтверждения, обсуждаются возможные применения в приложениях, в частности, плазменная сепарация макрочастиц по выделенному признаку.
7. Разработана методика определения границ применимости модельного подхода, основанная на анализе функциональных зависимостей решений системы ионизационных уравнений в пространстве

параметров задачи. Исследованы границы применимости модели неравновесной НТП с КДФ. Показано, что в области параметров реализующихся в приложениях.  $T = [1000-5000]K$ ,  $p \in 0,01-10 \text{ МПа}$ ,  $n_e, n_i \in [10^{14}-10^{22}]m^{-3}$ ,  $I_a, W \in [2,8] \text{ эВ}$ ,  $E_0 < 10^4 \text{ кВ/м}$ .

8. Разработаны численные модели и алгоритмы их реализации на компьютерах IBM/AT. Проведены модельные численные эксперименты по расчету зависимостей электрофизических параметров неравновесной гетерогенной плазмы от напряженности внешнего поля  $E_0$ . Отмечена хорошая обусловленность статистической модели квазинейтральных ячеек.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИИ ОТРАЖЕНЫ В РАБОТАХ:

1. Маренков В.И., Голяк В.А., Мохамед Ибрагим. Уравнение состояния плазмы с конденсированной дисперсной фазой.- В кн.: Плазменные и МГД-генераторы.- Киев: ОВПЭ ИПЭ АН Украины.- 1992.- С.148-160.
2. Ливяндовский Л.М., Маренков В.И., Мохамед Ибрагим. Влияние внешнего электрического поля на ионизацию низкотемпературной плазмы с конденсированной дисперсной фазой.- В кн.: Физика импульсных воздействий на конденсированные среды. Тезисы докл. 6-й научной школы.-Николаев, ИПТ АН Украины.- 1993.- С. 102-103.
3. Маренков В.И., Титов Д.В., Мохамед Ибрагим. Электростатические неоднородности в слабонеравновесной гетерогенной плазме во внешнем статическом поле  $E_0$ .- В кн: XVI конференция стран СНГ по вопросам испарения, горения и газовой динамики дисперсных систем. Тезисы докладов. 21-24 сент. 1993.- Одесса:ОГУ,- 1993.- С.130.
4. Маренков В.И., Голяк В.А., Мохамед Ибрагим. Влияние параметров плазмы с частицами на плотность электрон-ионной компоненты// Физика взродис. систем.-1993, Вып.35.- С. 155- 165.

Подп. к печати 8.10.93г. Формат 60x84 1/16.  
Объем 0,5уч. изд. л. 1,2 п. ш. Заказ № 1748. Тираж 100 экз.  
Гортипография Олесского управления по печати цех №3.  
г. Ленина 49.

168651

AB 28.135

**AB 28.135**