

Министерство образования Украины

Одесский государственный университет им. И.И. Мечникова

На правах рукописи

Мохамед КУНАЙДИ

**Физическое моделирование ионизации
в плазме с конденсированной дисперсной фазой
на основе приближения Томаса - Ферми
для электронной компоненты макрочастиц**

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 - 1995

539.19
536

ЛНБ України ім. В. Стефаника

Работа выполнена на кафедре физики
Одесского государственного университета



00761510 (K)

Научный руководитель:

кандидат физико-математических наук,
доцент Мареников В.И.,

научный консультант:

доктор физико-математических наук,
профессор Адамян В.М.

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,
профессор Швец В.Т.
Одесская государственная Академия Холода

доктор физико-математических наук,
профессор Шевчук В.Г.
Одесский государственный университет им. И.И. Мечникова

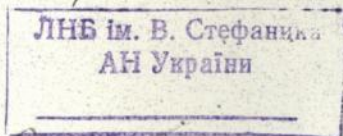
Ведущая организация: Киевский государственный университет им. Т.Г. Шевченко

Защита состоится 29^{го} ноября 1995 года в 14⁰⁰ час
на заседании специализированного совета Д. 068.24.03 по физико-математическим
наукам (физика) в Одесском государственном университете им. И.И. Мечникова по
адресу: г. Одесса, ул. Щепкина, 14, Большая физическая аудитория

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке
ОГУ им. И.И. Мечникова

Автореферат разослан 27^{го} октября 1995 года.

Ученый секретарь
специализированного совета,
кандидат физико-математических наук,
доцент



Cellan

Маргащук С.В.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Повсеместное внедрение плазменных технологий в различные отрасли современного производства (обработка материалов в плазменном факеле, синтез новых веществ в плазмохимических установках, использование плазмы в качестве рабочей среды в МГД- и ЭГД-генераторах, установках энергетического и технологического горения, регулирование и управление режимами высокотемпературных порошковых технологий, оптимизация характеристик плазмообразующих процессов - электрического взрыва проводников, воздействия мощного лазерного излучения на конденсированные среды и др.) стимулирует и определяет постоянный интерес к физическим исследованиям в области плазменного состояния вещества, в которой плазма сосуществует с конденсированной фазой. При этом наиболее часто плазменная среда является системой, состоящей из двух подсистем: ионизированной газовой фазы и ансамбля макрочастиц конденсированной дисперсной фазы (КДФ), обменивающегося энергией, импульсом и электрическим зарядом с газовой подсистемой. Область термодинамических параметров такой гетерогенной среды лимитируется кривой сосуществования газовой и конденсированной фаз, из которой состоят конденсированные частицы. В зависимости от температуры и давления плазма с конденсированной дисперсной фазой (ПКДФ) проходит весь спектр возможных состояний - от идеального бoльцмановского газа слабо взаимодействующих частиц до сильно скоррелированных состояний квазотвердой плазмы. Однако область температур $T \geq 4000$ К и концентраций (давлений) по электронной компоненте $\sim 10^{21} + 10^{26}$ м⁻³, характерная для ПКДФ в установках с высокими удельными энерговкладами (взрыв проводников, взаимодействие вещества с мощным лазерным излучением, ряд новых отраслей современной плазменной high technology), до настоящего времени изучена слабо, и здесь чувствуется настоятельная необходимость в разработке теории электрофизических свойств ПКДФ. Ввиду сложности теоретического описания баланса объемных и поверхностных процессов в гетерогенной среде с дальнедей-

ствующими кулоновскими силами на фоне существенных вкладов потенциальных взаимодействий, до сих пор не разработаны и отсутствуют адекватные подходы к моделированию ионизационного равновесия в плотной высокотемпературной ПКДФ. Кроме того, даже при низких температурах и давлениях вблизи мелких конденсированных частиц (КЧ), несущих макроскопические заряды, локальное максвелловское поле становится большим, что приводит к возникновению локальных кулоновских неоднородностей вблизи поверхности КЧ, которые непосредственно сказываются на ионизационных характеристиках КЧ (работе выхода) и, соответственно, должны быть учтены. Это выдвигает на передний план важный аспект в теории свойств ПКДФ, полностью игнорирующийся в известных модельных подходах - проблему учета взаимообусловленного влияния распределений внутренних электронов макрочастиц по энергиям на электрофизические характеристики ПКДФ в целом.

Перечисленные моменты определяют актуальность исследований термонизации плазмы с конденсированной дисперсной фазой с учетом квантовых состояний внутренних электронов отдельных КЧ, проведенных в диссертационной работе и ориентированных на построение общей адекватной модели, описывающей свойства ПКДФ в области высоких температур и давлений.

К главным целям работы относятся: 1) построение физической модели термонизации ПКДФ, учитывающей распределения внутренних электронов макрочастиц по энергиям; 2) разработка принципов моделирования электрофизических характеристик гетерогенной плазмы с КДФ в области высоких температур и давлений; 3) определение структуры зарядовых неоднородностей ПКДФ и их вклад в свободную энергию плазмы; 4) проведение компьютерного эксперимента и сравнительного анализа теоретических модельных подходов к описанию свойств плазмы с частицами КДФ; 5) совершенствование методики анализа и расчета границ применимости развиваемого подхода, ориентированной на компьютерный эксперимент.

Научная новизна

1. Впервые предложена физическая модель термоионизации ПКДФ явно учитывающая влияние параметров распределения внутренних электронов макрочастиц по энергиям на ионизационные характеристики ПКДФ в целом. В рамках приближения Томаса-Ферми для электронов проводимости КЧ найдено распределение локального электрохимического потенциала в объеме частиц КДФ, контактирующих с плазмой.
2. Впервые получено аналитическое уравнение, связывающее распределение самосогласованного электростатического потенциала в объеме КЧ с ее собственными параметрами (энергией Ферми невозмущенного вещества КЧ, ее размером r_p , диэлектрической проницаемостью ϵ_r и параметрами плазменной среды в целом (температурой - T , средними концентрациями частиц КДФ - n_p и электронов - n_e в объеме).
3. На основе анализа поведения функционала свободной энергии Гельмгольца ПКДФ в пространстве определяющих параметров показано, что микроструктура кулоновских неоднородностей в плазме (областей нелинейного экранирования вблизи макрочастиц) однозначно дефинирована термодинамическими параметрами плазмы - равновесными температурой и давлением. Обнаружена область термоионизационного равновесия ПКДФ, при более высокой, по сравнению с равновесной, ионизацией газовой фазы.
4. Разработаны алгоритм и эффективная программа его численной реализации применительно к решению нелинейного уравнения Пуассона-Больцмана в неограниченной области, асимптотически приближающегося с заданной точностью к точному решению дифференциального уравнения типа Эмдена с однородными граничными условиями Дирихле-Неймана на бесконечности.

Практическая ценность:

Общие формулы для распределения внутреннего самосогласованного потенциала в объеме металлических частиц КДФ, контактирующих с ПКДФ,

полученные в работе, могут с минимальной модификацией применяться для расчета микрополей в контактном слое полупроводниковых частей (например, высокотемпературных окислов). Подход, развитый здесь на основе приближения Томаса-Ферми для электронов проводимости металлической КДФ, непосредственно применим к макрочастицам из других материалов, находящимся в контакте с плазменной средой.

Положения модели "TF-ND" разработанной для неидеальной ПКДФ в плане сопряжения внешней и внутренней задач для отдельной КЧ, являются конструктивной основой для физических моделей "квантовой плазмы" с макрочастицами.

Пакеты программ плазменного расчета, разработанные в диссертации, позволяют вести компьютерный эксперимент в широкой области параметров состояния ПКДФ, и могут непосредственно применяться для проведения конкретных расчетов электрофизических параметров плотной гетерогенной плазмы с КДФ.

Научные положения и результаты, выносимые на защиту:

- модельный подход к описанию термической ионизации газа и частиц в ПКДФ на основе учета состояний внутренних электронов КЧ в рамках приближения Томаса-Ферми;
- аналитические формулы расчета для распределения самосогласованного потенциала и локального максвелловского электрического поля внутри и вне выделенной макрочастицы, контактирующей с плазмой;
- результаты компьютерного моделирования и сравнительного анализа численных расчетов электрофизических параметров ПКДФ в предлагаемой модели (учитывающей состояния внутренних электронов КЧ) и моделях с линейным характером экранирования макрозарядов, в которых КЧ имеют постоянную работу выхода электронов с поверхности;
- положения и принципы построения физической модели экранировки макрочастиц в плотной высокотемпературной ПКДФ, ориентированной на получение результатов методом минимизации свободной энергии

Гельмгольца;

Апробация результатов.

Результаты работы докладывались на "Шестнадцатой конференции стран СНГ по вопросам испарения, горения и газовой динамики дисперсных систем" (г. Одесса, 1993 г.), IV научной школе "Физика импульсных воздействий на конденсированные среды" (ИИПТ НАН Украины, г. Николаев, 1993 г.), были представлены на Международной Конференции по Статистической Физике STATPHYS-19 (г. Ксиамен, Китай, 1995 г.), Ежегодной Сессии Американской Ассоциации Аэрозольных Исследований (г. Питтсбург, Пенсильвания, США, 1995), Интернациональной Конференции по Физике Сильно Связанной Плазмы (г. Бинц, Германия, 1995 г.), неоднократно докладывались и обсуждались на научных семинарах кафедр теплофизики и теоретической физики Одесского государственного университета.

Публикации: Основные результаты диссертации изложены в семи печатных работах.

Структура диссертации. Работа состоит из введения, 4-х глав, выводов и приложений. Содержит 155 страниц основного текста, 23 рисунков, 3 таблиц, 147 наименований цитированных литературных источников, 8 приложений на 16 страницах.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность темы диссертационных исследований. Акцентируется внимание на необходимости разработки физических моделей гетерогенной плазмы с макрочастицами с учетом свойств внутренних электронов КДФ и существенного вклада потенциальных взаимодействий электронов ПКДФ в высокотемпературной области в функционал свободной энергии. Формулируются направления, цели и задачи диссертационных исследований.

Первая глава носит обзорный характер. Здесь рассмотрены существующие подходы к описанию и теоретическому моделированию свойств ПКДФ в различных термодинамических состояниях. Выделено три направления в моделировании термоионизационного равновесия в гетеро-

генной плазме с КДФ: 1) модели с использованием в качестве констант конвизационного равновесия идеально-газовых констант Саха; 2) подходы, заимствующие представления из теории слабых растворов сильных электролитов Дебая-Хюккеля; 3) ячеечные модели - сводящие проблему взаимодействия электромагнитных полей и зарядов в ПКДФ к эффективной задаче о распределении самосогласованного электростатического потенциала $\phi(r)$ и объемного заряда $\rho(r)$, в ограниченной пространственной области - ячейке электронной гравитации. Отмечается общий недостаток перечисленных моделей ПКДФ - предположение о малости потенциальных взаимодействий в плазме по отношению к средней кинетической энергии их поступательного движения: $e \phi(r) \ll kT$, что лимитирует их применимость при описании плотной высокотемпературной ПКДФ, используемой в современных технологиях. Определены условия термоионизационного равновесия отдельных КЧ с газовой плазмой. Установлено, что термодинамическое условие равенства локальных электрохимических потенциалов электронной компоненты газовой фазы и электронов проводимости отдельной КЧ является физическим основанием коррекции формулы Ричардсона-Дешмана для потока электронов термоэмиссии с ее поверхности. Задачу о распределении самосогласованного потенциала и объемного заряда внутри макрочастиц предложено решать в приближении Томаса-Ферми для электронов контактного слоя частиц КДФ. В разделе 1.4 применительно к различным электронным системам (многоэлектронный атом, твердое тело) дан краткий обзор известных результатов томас-фермиевского приближения и обсуждены особенности квазиклассического приближения для многочастичных систем.

Вторая глава посвящена проблеме описания равновесных распределений электрических микрополей и зарядов в ПКДФ с учетом энергетических состояний электронов проводимости макрочастиц. В термодинамически равновесных состояниях ПКДФ локальный электрохимический потенциал

$$\mu(\vec{r}) = E_F(\vec{r}) + kT \Phi(\vec{r}) = \text{const} \quad (1)$$

внутри объема КЧ однороден и определяется локальными значениями энер-

гии Ферми - $E_F(r)$, и самосогласованного электростатического потенциала $\Phi(r) = e \varphi(r)/kT$. Учитывая соотношение (1), формулу для объемного заряда КЧ, найденную в приближении Томаса-Ферми для концентрации электронов проводимости КЧ:

$$\rho(\vec{r}) = \frac{e}{3\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left\{ [E_F^0]^{3/2} - [E_F^0 + kT\Phi(\vec{r})]^{3/2} \right\}, \quad (2)$$

и малость потенциала Φ по сравнению со значениями E_F^0 - энергией Ферми вещества КДФ ($kT\Phi(r) \ll E_F^0$), задачу о распределении Φ в объеме сферической КЧ, контактирующей с неограниченной изотропной плазмой запишем

$$\left. \begin{aligned} \Phi'' + \frac{2}{r} \Phi' &= \frac{2e^2}{\epsilon\pi} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E_F^0} \Phi(r) \\ \Phi(0) &= \Phi_0; \quad \Phi'(r_p) = -ze^2 / (r_p^2 kT) \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

Здесь: m_e - масса электрона; $\hbar = h/2\pi$, h - постоянная Планка; r_p , ϵ_p - размер и диэлектрическая проницаемость КЧ.

Решение (3) при дополнительном условии $\Phi(0) = 0$, следующим из сферической симметрии задачи, будет

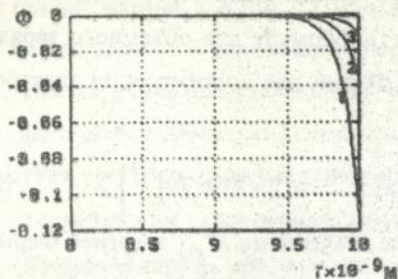
$$\Phi(r) = \Phi_0 \frac{\text{sh}(\omega_F r)}{\omega_F r} \quad (4)$$

$$\text{где } \omega_F^2 = \frac{2e^2}{\epsilon\pi} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E_F^0} \quad (5)$$

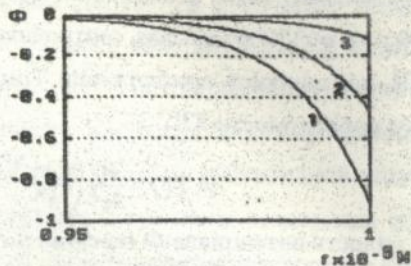
Дифференцируя потенциал (4) по r

$$\Phi'(r) = \Phi_0 \omega_F \frac{\omega_F r \text{ch}(\omega_F r) - \text{sh}(\omega_F r)}{(\omega_F r)^2}, \quad (6)$$

и сравнивая полученное значение - (6) с условием Неймана (2-е условие в (3)) на границе КЧ, видим, что знак заряда z противоположен знаку самосогласованного потенциала Φ_0 в центре частицы. Физически это соответствует (см. ф. (1)) повышению (понижению) уровня электрохимического потенциала для положительных (отрицательных) частиц КДФ в сравнении с его значением для электронейтральных КЧ при тех же термодинамических условиях. Результаты модельных расчетов на основе (2) + (4) приведены на рис.1.



а



б

Рис.1. Распределение самосогласованного потенциала в объеме макро-частиц. 1а - кривые 1-3 соответствуют $n_p = 10^{16}, 10^{17}, 10^{18} \text{ М}^{-3}$; $T = 3000 \text{ К}$; $W = 4.53 \text{ эВ}$; $r_p = 10^{-8} \text{ М}$; $\epsilon = 3$. 1б - кривые 1 - 3 рассчитаны для разных работ выхода: $W = 2.53, 3.53, 4.53 \text{ эВ}$ при $T = 4000 \text{ К}$; $r_p = 10^{-8} \text{ М}$; $n_p = 10^{18} \text{ м}^3$, $\epsilon = 3$.

Общей особенностью зависимостей потенциала в объеме КЧ от расстояния (в лагранжевых координатах оно отсчитывается от центра КЧ) является практически однородное распределение Φ внутри макрочастиц и достаточно быстрое падение в поверхностном контактном слое, толщиной $\delta \sim \epsilon^{-1}$ (см. рис. 1а и 1б). Электроны именно этого слоя дают вклад в дешмановский поток термоэмиссии. И в разделах 2.2, 2.3 последовательно решается задача моделирования состояний термодинамического равновесия плазмозоля - наиболее простой двухфазной системы, состоящей из электронов, эмитировавших их частиц КДФ и буферного газа, и обладающей отличительным свойством плазменных сред - квазинейтральностью. В рамках дебаевского и ячеечного подходов построены модели ионизационных процессов в плазмозоле идентичных металлических частиц на основе явного учета в соответствии с приближением Томаса-Ферми перераспределения электронной плотности внутри КЧ. Система ионизационных уравнений (выражающих закон сохранения заряда плазмозоля в целом и зарядовой устойчивости отдельных макро-частиц) в каждом из случаев приводится к одному трансцендентному уравнению. В "дебаевском" случае - относительно зарядового числа КЧ

$$\Psi(x) = \frac{x n_p}{n_0} \left[1 + \frac{x e^2}{r_p k T} \frac{1}{(1 + \omega_D r_p)} \right] - \left[1 + \gamma_F \frac{x e^2}{r_p k T} \right] = 0, \quad (7)$$

$$\omega_D^2 = \frac{4\pi e^2 n_p}{kT} z(z+1); \quad \gamma_F = \frac{th(\omega_F r_p)}{\varepsilon [\omega_F r_p - th(\omega_F r_p)]}$$

Для статистической модели квазинейтральных ячеек - относительно обратной дебаевской длины свободных электронов на границе усредненной по ансамблю реализаций плазмозоля электронейтральной области (ячейки):

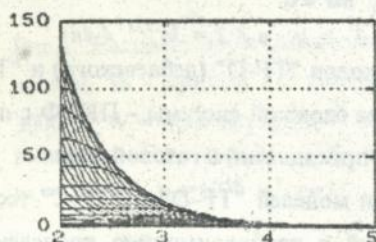
$$\Psi(\omega) = ((\omega / \omega_0)^2 (\omega a / 2 - thx) - \omega r_p / chx + (th(\omega_F r_p) / \varepsilon) / ((\omega_F r_p - th(\omega_F r_p))(x - thx + \omega^2 a / 2 r_p) thx) = 0$$

$$\omega^2 = 4\pi e^2 / (kT) n_{00}; \quad x = \omega(a / 2 - r_p); \quad a / 2 = 3n_p^{-1/3} / 4\pi \quad (8)$$

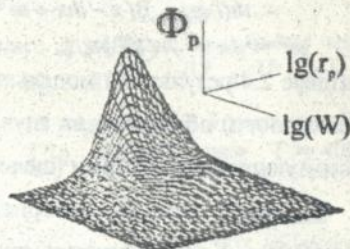
В разделе 2.4 результаты модельных подходов "TF-D" (дебаевского) и "TF-C" (ячеечного) обобщены на случай более сложной системы - ПКДФ с легкоионизирующимися атомами (щелочными присадками) в газовой фазе.

В главе 3 вопросы алгоритмизации моделей "TF-D" и "TF-C" тесно увязываются с требованиями приложений и необходимостью проведения компьютерного эксперимента с целью прогноза и анализа применимости расчетных данных в заданной области исходных термодинамических параметров. В программах "TDKM.FOR" и "TKM.FOR", написанных на Microsoft FORTRAN'e, применительно к возможностям: IBM/AT - 386, 486; PS - 2; воплощен и реализован весь комплекс задач численного моделирования зависимостей электрофизических характеристик плазмозоля. Модельные уравнения и их программные аналоги в явном виде содержат параметры, характеризующие электронные и диэлектрические свойства КЧ (энергию Ферми и диэлектрическую проницаемость вещества частиц КДФ). Математически эти параметры проявляют себя посредством фактора γ_F , входящего в (7) и (8). Физически он выражает отношение внутреннего потенциала (при $r_p = r_p - 0$) КЧ, к кулоновскому потенциалу частицы $\Phi_Q = ze^2 / (r_p kT)$, явно выделяя, таким образом, вклад собственных внутренних параметров КЧ в равновесные характеристики плазмы. В области низких температур ($T < 4000$ К), как показывает численный эксперимент, диэлектрические свойства слабо влияют на значения поверхностного потенциала КЧ, и, соответственно, на

общий уровень ионизации ПКДФ, и главный вклад в электрофизические характеристики вносят работа выхода (совпадающая для металлической КДФ с E_p^0) и собственный размер КЧ. На рис.2 приведен общий вид зависимости потенциала поверхности макрочастицы в плазме (в относительных единицах) от работы выхода (W) - рис.2а; и, в логарифмических координатах на плоскости (r_p, W) -рис.2б (температура плазмы $T=2000$ К ; концентрация КЧ $n_p = 10^{17} \text{ м}^{-3}$; диэлектрическая проницаемость КЧ $\epsilon_p = 3$).



а



б

Рис.2. Общий вид зависимости потенциала поверхности дисперсной частицы Φ_p в координатах (W) - а и $[\lg(W), \lg(r_p)]$ - б.

Обращает на себя внимание факт наличия локального экстремума у функции $\Phi = \Phi(r_p, W)$ по координате r_p . Физически это обусловлено тем, что рост размера эмиттеров (частиц КДФ) в области малых r_p сопровождается достаточно быстрым изменением их равновесного заряда, вследствие действия факторов γ_f в (8), который для $r_p \leq 1/\alpha_f$ меняется экспоненциально; стабилизация и падение поверхностного потенциала Φ_p в области больших размеров КЧ объясняется тем, что размеры скин-слоя уже малы по сравнению с r_p , и практически не влияют на зарядку КЧ. Характер падения самосогласованного потенциала Φ вне макрочаряда отражает рис. 3, на котором приведен пространственный график зависимости Φ^0 от радиальной координаты,

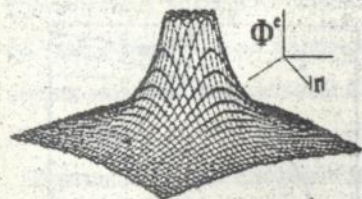


Рис.3. Распределение $\Phi^e(\vec{r})$ вне КЧ.

в плазмозоле частиц вольфрама с параметрами: $T=4000$ К; $n_p=10^{16}$ м⁻³; $\epsilon_p=3$; $r_p=10^{-8}$ м. Расчет выполнен согласно формулам модели "TF - C" по программе

"TKCM.FOR" разработанной в разделе 3.3 диссертации. Как показывает более детальный сравнительный анализ (раздел 3.4 диссертации) результатов расчета характеристик ПКДФ в моделях "TF - D" и "TF-C" с соответствующими данными дебаевского и ячеечного подходов, без учета квантовых поправок для внутренних электронов макрочастиц, факторы способствующие ионизации индивидуальных КЧ сопряжены с необходимостью последовательного учета распределения электронов проводимости контактного слоя макрочастиц по энергиям. В разделе 3.4 кумулятивное действие этих факторов обсуждается с использованием собирательного параметра - эффективной работы выхода макрочастиц

$$W^o = W + kT (\Phi_p^i + \Phi_p^e) \quad (9)$$

Показано, что учет в рамках приближения Томаса-Ферми распределения электронов в контактном слое частиц КДФ приводит к снижению эффективной работы выхода (9). В результате расчетные зависимости для концентрации электронов и заряда частиц КДФ в области $T > 2000$ К идут гораздо выше (рис. 4) и лучше "приближают" экспериментальные данные.

В итоге сформулирован важный обобщающий вывод о том, что в ПКДФ, образованной мелкодисперсной КДФ, буферным газом и эмитированными КЧ электронами, учет перераспределения электронов проводимости на макрочастицах необходим начиная с $T \geq 2000$ К во всей области работ выхода КЧ, ($W \leq 8$ эВ), наблюдаемых на эксперименте.

Теоретические подходы для гетерогенных кулоновских систем большой плотности до настоящего времени еще не разработаны, и в следующей, 4-й

главе, предприняты некоторые шаги в этом направлении.

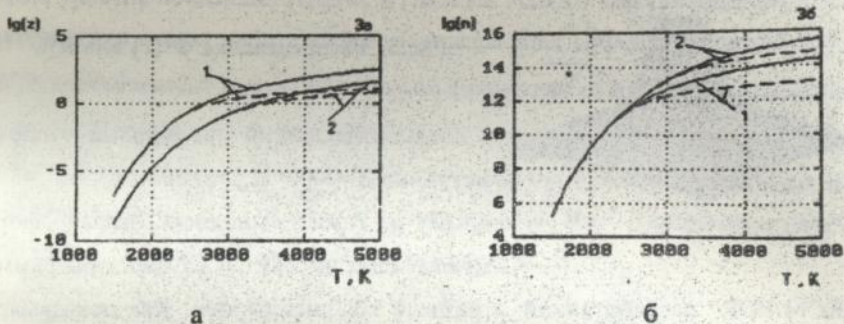


Рис.4. Температурные зависимости заряда (а) макрочастиц и концентрации электронов (б) в ПКДФ в статистической модели квазинейтральных ячеек, кривые “-” -рассчитаны с учетом квантовых поправок, а “- -” - без их учета. (1- $n_p = 10^{18} \text{ м}^{-3}$; 2- $n_p = 10^{20} \text{ м}^{-3}$).

Четвертая глава посвящена построению адекватной модели нелинейного экранирования макрочарядов в неидеальной ПКДФ. В результате коллективных взаимодействий и корреляций в движении зарядов ПКДФ - она обладает свойством квазинейтральности и наличием определенного пространственного масштаба разделения зарядов в объеме. Самосогласованный электростатический потенциал в лагранжевых координатах отдельного заряда экранируется, и на больших расстояниях эффективное взаимодействие этого заряда с другими зарядами системы (ПКДФ) ослабляется. В неограниченной плазме “на бесконечности” (на расстояниях $r \gg r_p$ от выделенного макрочаряда) самосогласованный потенциал $\Phi(r)$ и его градиент $\vec{\nabla}\Phi(r)$ обращаются (в силу указанных причин) в ноль. Поскольку, с другой стороны, они являются непрерывными монотонными функциями на полуограниченном отрезке $[r_p, \infty)$, то всегда можно указать, такую точку $r = r_1$, начиная с которой они по модулю не будут превышать сколь угодно малого, наперед заданного $\epsilon > 0$. На интервале $r \in [r_1, \infty)$ вследствие малости потенциала $\Phi \ll \epsilon \ll 1$, уравнение Пуассона с нелинейной правой частью всегда может быть представлено в линеаризованном по потенциалу виде, причем порядок от-

брасываемых членов разложения не будет превышать величины $\sim \epsilon^2$. Именно это обстоятельство положено в основу построения расчетных математических моделей неидеальной плазмы с конденсированной дисперсной фазой (НПКДФ).

В разделе 4.1 для плотного высокотемпературного плазмозоля, электроны и макрочастицы КДФ которого в самоогласованном поле $\Phi(r)$ "распределены по Больцману", рассмотрены условия термоионизационного равновесия отдельной КЧ и, с учетом распределений внутренних электронов КДФ в приближении Томаса-Ферми, последовательно строится модель термической ионизации в неидеальном плазмозоле идентичных макрочастиц.

Как и ранее (гл. 2 - 3), общая система ионизационных уравнений монодисперсного плазмозоля содержит: закон сохранения заряда, условия баланса потоков внешних и внутренних электронов на поверхности КЧ и непрерывности градиента самоогласованного потенциала.

$$\begin{aligned} \langle n_e \rangle &= z \langle n_p \rangle \\ \langle n_e \rangle \exp[\Phi^e(\tilde{r}_p)] &= n_e \exp[-\Phi^i(\tilde{r}_p)] \quad (10) \\ \Phi^i(r_p) = \Phi^i(r_p - 0) &= \frac{\omega^2}{4\pi n_p r_p \epsilon_p} \frac{\text{th}(\omega_F r_p)}{[\omega_F r_p - \text{th}(\omega_F r_p)]} \end{aligned}$$

где: $\langle n_e \rangle$, $\langle n_p \rangle$ - средние объемные значения концентраций электронов и частиц КДФ на бесконечности; верхние индексы "e" и "i" относятся к решению "внешнего" и "внутреннего" уравнений Пуассона соответственно; параметр ω - инвертированная длина Дебая для электронов на бесконечности. Используя безразмерные расстояния и обратную дебаевскую длину

$$\tilde{r} = \omega r = \tilde{\omega} \tilde{r}_p, \quad \tilde{\omega} = \omega / \omega_p \quad (11)$$

систему ионизационных уравнений (10) можно привести к одному трансцендентному уравнению

$$\Psi(\tilde{\omega}) = 2 \ln \tilde{\omega} - \tilde{\omega}^2 - t + \Phi^e(\tilde{r}_p) = 0 \quad (12)$$

Здесь:

$$t = \frac{\omega_p^2}{4\pi n_p r_p \epsilon_p} \frac{\text{th}(\omega_F r_p)}{[\omega_F r_p - \text{th}(\omega_F r_p)]} \quad (13)$$

Так как в неидеальном плазмозоле $\Phi^e(r)$ принимает большие по модулю

значения $\Phi^e \gg 1$, определить $\Phi^e(\bar{r}_p)$, входящее в (12) из нелинейного уравнения Пуассона с бoльцмановской правой частью и однородными условиями Дирихле-Неймана на бесконечности:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d^2 \Phi^e(\bar{r})}{d\bar{r}^2} + \frac{2}{\bar{r}} \frac{d\Phi^e(\bar{r})}{d\bar{r}} &= \exp[\Phi^e(\bar{r})] - \exp[-z \Phi^e(\bar{r})] \\ \Phi^e(\bar{r}) \Big|_{\infty} &= 0; \quad \frac{d\Phi^e(\bar{r})}{d\bar{r}} \Big|_{\infty} = 0 \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

аналитически и непосредственным применением известных приближенных методов (Рунге-Кутта, Блесса и др.), вследствие неустойчивостей и потерь точности на полуограниченном интервале $[\bar{r}_p, \infty)$, не представляется возможным. В разделе 4.2 диссертации, основываясь на формулах и соотношениях, полученных в 4.1, и с использованием принципа минимума свободной энергии Гельмгольца, разработан и воплощен в эффективный алгоритм метод численного решения уравнения Пуассона-Больцмана (14) с любой, наперед заданной точностью ϵ , допускаемой возможностями современных ЭВМ.

Расчет электрофизических характеристик (средних зарядов КЧ, распределения плотности заряда и максвелловской электронной концентрации внутри частиц КДФ) реализует программа "KUM.FOR", разработанная на языке Microsoft FORTRAN.

Далее детально, на уровне отдельных операторов, рассмотрено конкретное воплощение алгоритма "TF-ND" (раздел 4.2) в реални конкретного плазменного расчета ионизации неидеальной ПКДФ (раздел 4.3).

В разделе (4.4) в безразмерных координатах инверсная длина Дебая ПКДФ - $(\bar{\omega})$, и внутренний потенциал поверхности незаряженной частицы КЧ - (t) , исследовано поведение функции $\Psi(\bar{\omega}, t)$ (ф. (12)) - математического аналога модели "TF-ND" в пространстве исходных (определяющих) параметров задачи. Показано, что в "бoльцмановском" плазмозоле в области параметров КДФ, для которых t (см. ф.(13)) принимает значения меньше $\bar{t} = \exp(-I)$,

возможна неравновесная ионизация плазмозоля, с более высокой, чем в равновесии ионизацией газовой фазы и КЧ со значениями $\tilde{\omega}$, лежащими "правее" соответствующих кривых Ψ_1 на рис.5а. $\Psi_1 = \Psi_1(\tilde{\omega}, t)$ определяет модуль безразмерного потенциала Φ_p^e , приобретаемый КЧ, погруженной в ПКДФ с заданным (известным) значением $\tilde{\omega}$, и определяется формулой

$$\Psi_1(\tilde{\omega}, t) = 2 \ln \tilde{\omega} - \tilde{\omega}^2. \quad (15)$$

Линии уровня функции (15) изображены на рис.5б, причем кривые 1-5 соответствуют значениям потенциала $\Phi_p^e = -0,5, 0,0, 1,0, 2,0, 3,0$. Кривая 2 на рис.5б ограничивает подмножество значений параметров, для которых плазмозоль неустойчив, выделяя тем самым устойчивые зарядовые состояния частиц КДФ. Безразмерные зависимости $\Psi_1(\tilde{\omega})$ приведенные на рис.5а (кривые 1 - 6 рассчитаны для параметров ПКДФ: $T=10000$ К, $n_p=10^{-6}$ м⁻³, $n_p=10^{16}$ м⁻³, $\lg t = -7; -6; -5; -4; -3; -2$, являются с точностью до знака (см. ф.(12)) зависимостями безразмерного потенциала макроскопического тела (с заданным t), погруженного в ПКДФ с известным уровнем ионизации, т.е. с известным значением $\tilde{\omega}$. Аналогичные рис.5а расчетные номограммы могут использоваться для определения потенциалов поверхности макроскопических тел, взаимодействующих с ПКДФ.

Раздел 4.5 завершает главу обобщенным анализом физических приближений и сопряженных с ними ограничений применимости результатов модели ПКДФ с нелинейным экранированием в практических расчетах ионизации гетерогенной плазмы в приложениях. Получены соотношения, выделяющие область применимости бальцмановских распределений электронов вблизи поверхности нелинейно-заэкранированных макрочастиц. Обсуждены возможные пути развития модельного подхода с использованием приближения Томаса - Ферми для электронов газовой фазы ПКДФ.

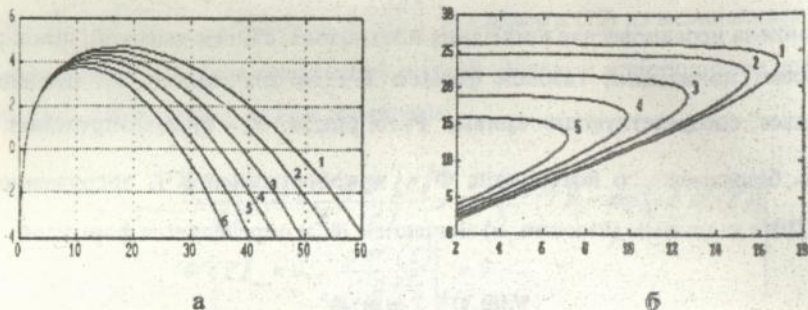


Рис.5. Функция $\Psi_1(\bar{x}, t)$: семейство графиков $\Psi_1(\bar{x}, t)$ при различных t - а; 2) линии уровня функции Ψ_1 . - б.

Основные результаты и выводы

1. Впервые предложена статистическая модель плазмы с конденсированной дисперсной фазой (ПКДФ), учитывающая энергетические состояния внутренних электронов конденсированных частиц (КЧ). На основе распределения Ферми - Дирака и с использованием приближения Томаса - Ферми для электронов проводимости макрочастицы, сформулирована проблема описания ионизационного равновесия и построена замкнутая система уравнений термической ионизации гетерогенной плазмы. Выявлен механизм и проанализированы физические причины изменения эффективной работы выхода электронов с поверхности КЧ, контактирующих с плазмой.
2. В лагранжевых координатах выделенной макрочастицы металлической КДФ найдено решение уравнения Томаса - Ферми, устанавливающего связь самосогласованного электростатического потенциала и локальной концентрации электронов проводимости в ее объеме в условиях контакта с ПКДФ. Уравнение получено с использованием условия однородности локального электрохимического потенциала в объеме КЧ и двух главных моментов, определяющих ее термоионизационную устойчивость в равновесии: равенства напряженностей локального максвелловского поля и баланса потоков внутренних и внешних электронов на ее поверхности.

3. Исследовано влияние определяющих термодинамических параметров плазмы и частиц (T , n_p , n_r , W , ϵ_p : T - температура ПКДФ, n_p , n_r - концентрация и размер КЧ, W , ϵ_p - работа выхода и диэлектрическая проницаемость вещества соответственно) на глубину залегания "уровня Ферми" отдельных макрочастиц в условиях контакта с ПКДФ. Обнаружено понижение эффективной работы выхода КЧ - W^* за счет перераспределения электронов валентной зоны в контактном слое заряженной макрочастицы. Выделены области параметров плазмы, в которых понижение энергии Ферми частиц КДФ существенно и влияет на ионизацию газовой фазы.
4. Разработаны математические модели термической ионизации ПКДФ ("TF-D" и "TF-C"), являющиеся "проекциями" предлагаемого подхода на класс дебаевских и ячеечных моделей слабоионизированной гетерогенной плазмы. Проведен детальный сравнительный анализ результатов расчета характеристик плазмы с учетом и без учета распределения электронов КДФ по энергиям. Определено, что начиная с температур $T \geq 2000$ К, корректное описание реализующихся состояний ПКДФ, сопряжено с необходимостью учета квантовых свойств электронов макрочастиц. В линейном приближении по потенциалу выполнен ряд модельных расчетов зависимостей электрофизических характеристик плазмозода частиц КДФ в области температур $T = 1000 + 4000$ К и с параметрами, охватывающими весь спектр возможных работ выхода, значений диэлектрических констант вещества КЧ, их размеров и концентраций - известных из эксперимента. Показано, что для всего множества возможных значений параметров КДФ, взаимодействующей с плазмой при высоких температурах, в области малых концентраций КЧ и в ПКДФ высокого давления использование моделей линейного экранирования макрочастиц не дает адекватного описания реализующихся состояний плазмы и необходима разработка модельных подходов с учетом нелинейных эффектов.
5. Впервые для ПКДФ с невырожденной бoльцмановской электронной компонентой в газовой фазе разработана адекватная модель нелинейной экра-

нировки макрозарядов плазмы. Выделены области параметров состояния ПКДФ, в которых реализуется нелинейное экранирование частиц. В численном эксперименте показано, что в равновесной неидеальной плазме с конденсированной дисперсной фазой структура и размер кулоновских неоднородностей дефинируются электростатическим вкладом в функционал свободной энергии Гельмгольца НПКДФ.

6. На базе физических положений и приближений статистического подхода к описанию ионизационного равновесия в НПКДФ разработан пакет прикладных программ на Microsoft FORTRAN'e - "ENES", реализующий расчеты электрофизических параметров, структуры электростатических неоднородностей плазмы (распределения локального максвелловского поля вблизи КЧ), электростатических вкладов (отдельных КЧ и объемных зарядовых неоднородностей) в функционал свободной энергии гетерогенной плазмы.
7. Найдена аналитическая связь поверхностного потенциала Φ_s макрочастицы в плазме с КДФ и плотности электронов в ее бoльцмановской атмосфере. Показано, что при заданной температуре НПКДФ возможна неравновесная ионизация с более высокой, чем в равновесии, концентрацией электронов в газовой фазе. Полученные соотношения рекомендованы для определения поверхностных потенциалов макроскопических тел, погруженных в плазму.
8. Проведен анализ выбранных физических приближений, определены границы применимости полученных соотношений. Показано, что во всем диапазоне температур и давлений, характерных для плазменных технологий, использующих ПКДФ, предложенная модель адекватно отражает реализующиеся состояния ионизации гетерогенной плазмы с частицами КДФ.

Основные результаты диссертации отражены в работах:

1. Адамян В.М., Кунайди М., Маренков В.И. Описание состояний гетерогенной плазмы в модели Томаса - Ферми. - В кн.: Физика импульсных воздействий на конденсированные среды. Тезисы докладов 6-й научной шко-

- лы. - Николаев, ИИПТ НАН України, 1993. - С.93 - 94.
2. Адамян В.М., Кунайди М., Маренков В.И. Томас - Фермиевское решение для электростатического потенциала в высокотемпературном аэрозоле. - В кн.: Шестнадцатая конференция стран СНГ по вопросам испарения, горения и газовой динамики дисперсных систем. Тезисы докладов, 21 - 24 сентября 1993. - Одесса, ОГУ 1993, С.130.
 3. Маренков В.И., Кунайди М., Титов Д.В. Моделирование ионизации плазмы с конденсированной дисперсной фазой на основе приближения Томаса - Ферми для электронной компоненты макрочастиц// Вестник Одесского государственного университета. - Одесса: ОГУ свид. № 271, сер. ОД. - 1995. - Вып.1, С.84 - 96.
 4. Marenkov V.I., Kounaidi M. Thomas - Fermi approximation for electron component in dense heterogeneous systems with Coulomb interaction. - The 19-th IUPAP International Conference on Statistical Physics.- Xiamen, China, 31 July - 4 August 1995, P. 87.
 5. Marenkov V.I., Chesnokov M.N., Kounaidi M. The electrophysical properties of heterogeneous flows with particulate condensed phase in the external electric fields. - AAAR'95 Fourteenth Annual Meeting, October 9-13, 1995, S.9, P.5.
 6. Маренков В.И., Кунайди М., Титов Д.В. Іонізація макрочастинок металу у густій бoльцманівській плазмі, з конденсованою дисперсною фазою./ Одеськ. ун-т. - Одеса, 1995. - 14 с. Бібл.: 8. - Деп. в ГНТБ України, 12.09.95, № 983,УК95.
 7. Кунайди М. Іонний внесок в електрофізичні характеристики слабкоіонізованої неідеальної плазми з макрочастинками./ Одеськ. ун-т. - Одеса, 1995. - 12 с. Бібл.: 6. - Деп. в ГНТБ України, 12.09.95, № 984, УК95.

Кунайди Мохамед. Фізичне моделювання іонізації у плазмі з конденсованою дисперсною фазою на основі наближення Томаса Фермі для електронного компоненту макрочастинок.

Дисертація на здобуття вченого ступеня кандидата фізико-математичних наук за фахом 01.04.14 - "Теплофізика та молекулярна фізика". Одеський державний університет ім. І.І. Мечникова. Одеса 1995.

Робота містить подальший крок у розвитку теорії іонізації гетерогенних кулонівських систем. На базі наближення Томаса-Фермі для електронного компоненту макрочастинок конденсованої дисперсної фази (КДФ), контактуючих з гетерогенною плазмою, започатковано новий статистичний підхід у моделюванні термоіонізаційної рівноваги плазми з конденсованою дисперсною фазою (ПКДФ). Виходячи з закону збереження заряду та умов зарядової рівноваги окремих частинок КДФ, розбудовано фізичну модель іонізації неідеального "больцманівського" плазмозолу - ПКДФ, електронний компонент якої складають електрони емісії з макрочастинок КДФ. Одержано нові дані щодо електрофізичних характеристик неідеальної ПКДФ в області високих тисків та температур. З'ясовано механізм зниження ефективної роботи виходу електронів з частинок КДФ у плазмі. Визначено межі застосування одержаних співвідношень. Показано, що впродовж всього діапазону температур та тисків, характерних для плазмових технологій запропонована модель адекватно відображує стани іонізаційної рівноваги ПКДФ.

Результати дисертаційної роботи доповнюють теоретичні розробки у фізиці гетерогенних плазмових систем.

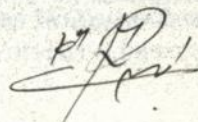
Kounaidi Mochamed. *Physical modelling of the ionization in plasma with condensed dispersed phase on the basis of Tomas - Fermi approximation for the electron component of macroparticles.*

Dissertation to obtain scientific degree of candidate of physical and mathematical sciences in speciality 01.04.14 - "Thermo physics and molecular physics". Odessa State University. Odessa 1995.

The investigation is a further step in the development of the ionization theory of heterogeneous Coulomb systems. On the basis of Tomas - Fermi approximation for the electron component of macroparticles of condensed dispersed phase (CDP) that are in a contact with the heterogeneous plasma a new statistical approach has been established in the modelling of thermoionizational equilibrium of the plasma containing condensed dispersed phase (PCDP). Proceeding from the charge conservation law and the conditions for the charge equilibrium of separate CDP - particles, the physical model has been developed for the ionization of non-ideal Boltzmann "plasmosol" - PCDP whose electron component contains electrons of emission from CDP - particles.

New data have been obtained on the electrophysical properties of non-ideal PCDP in the range of high temperature and pressure. The mechanism of decreasing of effective electrons work of exit from CDP - particles in the plasma has been cleared up. The application range of the obtained relations has been determined. It is shown that in the whole range of temperature and pressure used in plasma technologies the proposed model adequately displays the equilibrium states in PCDP.

The results of the dissertation complement the theoretical investigations in the physics of heterogeneous plasma systems.



Подписано к печати 27.10.1995 г. Объем 0,89 печ. л.

Формат 60x84¹/16. Зак. 186. Тираж 100.

Типография УГАС им. А.С.Попова. Одесса, Старопорт-Франковская, 61

444886

