

局域热力学平衡态空气电弧等离子体 输运参数计算研究*

王伟宗¹⁾²⁾ 吴翊^{1)†} 荣命哲¹⁾ 杨飞¹⁾

1) (西安交通大学电气工程学院, 电力设备电气绝缘国家重点实验室, 西安 710049)

2) (英国利物浦大学电机工程与电子系, 英国, 英格兰利物浦 L69 3GJ)

(2011年6月6日收到; 2011年8月26日收到修改稿)

空气电弧等离子体的物性参数为空气电弧放电过程的仿真提供了可靠的微观理论基础和参数输入. 假定体系处于局域热力学平衡态, 基于 Chapman-Enskog 理论, 采用 Sonine 多项式三级展开 (对黏滞系数采用二级展开) 得到的输运参数表达式, 数值计算得到了不同气压条件下 (0.1 atm—20 atm, 1 atm = 1.01325×10^5 Pa)、不同温度范围内 (300—30000 K) 空气电弧等离子体的输运参数 (扩散系数、黏滞系数、热导率、电导率). 与以往的理论研究相比, 最新的相互作用势和碰撞截面研究成果被应用到涉及粒子的碰撞积分计算中, 提高了输运参数计算结果的精度和可靠性.

关键词: 空气电弧, 局域热力学平衡态, 输运属性, 碰撞积分

PACS: 52.25.Fi

1 引言

空气电弧等离子体属于低温等离子体的一种, 在开关电器、焊接、材料处理等领域具有广泛的应用^[1]. 电弧现象是一个热场、气流场、电磁场之间相互耦合变化的复杂过程^[2]. 随着电弧模型研究和计算磁流体学的不断发展, 通过数值仿真研究电弧特性成为可能, 并且被越来越多地应用^[3-6]; 而数值计算仿真结果的可信度与电弧等离子体物性参数 (粒子组分、热力学参数与输运参数) 的精度密切相关.

高温条件下电弧等离子体的物性参数较难用实验测量, 因此, 其理论估算是一个活跃的课题. 电弧等离子体的粒子组分可以通过求解元素化学计量守恒、Dalton 分压定律、质量作用定律以及电荷等中性条件组成的非线性方程组取得^[7,8]. 也可以利用系统最小 Gibbs 自由能法计算得到^[9]. 电弧等离子体的统计热力学属性在粒子组分已知的前

提下由标准的热力学表达式获得. 这两种物性参数的不确定度和配分函数的计算方法、计算考虑的粒子种类以及数值迭代求解的准确度相关, 计算方法相对成熟, 不同作者计算结果的一致性较好. 电弧等离子体输运参数 (通常指的是扩散系数、黏滞系数、热导率、电导率) 的可靠性除了与粒子组分的计算精度有关, 主要取决于粒子之间相互作用势的精度. 值得注意的是后者仍存在较大的不确定度, 这是不同文献在这一参数的计算上出现偏差的原因.

长期以来, 国外学者对空气电弧等离子体的粒子组分构成、统计热力学性质以及输运性质都有深入研究^[10-14]. 近年来, 随着量子化学计算技术的发展和粒子相互作用势研究的深入, 粒子之间相互作用碰撞积分的精度不断提高, 对输运参数更高精度的更新成为可能.

本文基于局域热力学平衡态假设, 采用最新的相互作用碰撞截面, 计算得到了不同压力条件

* 国家自然科学基金 (批准号: 51177124)、国家自然科学基金青年科学基金项目 (批准号: 51007072) 和教育部博士点优选基金 (批准号: 20110201130006) 资助的课题.

† E-mail: wuyic51@mail.xjtu.edu.cn

下 (0.1—20 atm, 1 atm = 1.01325 × 10⁵ Pa)、不同温度区间 (300—30000 K) 内空气电弧等离子体的输运参数, 并与以往文献中的理论计算进行了对比分析, 为空气电弧特性的数值仿真研究提供了更为精确的参数数据.

2 输运参数的计算方法

电弧等离子体的输运参数与粒子质量、动量和能量的传输有关, 而后者由分子的随机运动和碰撞完成, 可用 Boltzmann 方程来描述. 该方程是一个复杂的多重积分微分方程, 直接求解非常困难, 可以基于局域热力学平衡态假设在流动平衡状态附近, 对其做 Chapman-Enskog 展开近似得到输运参数 [15,16]. 计算中, 假定各个粒子的速度分布函数处于 Maxwell 分布的一阶微扰逼近, 将分布函数展开成 Sonine 多项式的有限级数, 对 Boltzmann 方程进行线性化近似处理. 借助 Sonine 多项式对分布函数一阶微扰的有限项展开, 输运参数最终表达为 [17,18]

$$D_{ij}(\xi) = \frac{\rho n_i}{2nm_j} \sqrt{\frac{2kT}{m_i}} c_{i0}^{j,i}(\xi), \quad (1)$$

$$D_i^T(\xi) = \frac{n_i m_i}{2} \sqrt{\frac{2kT}{m_i}} a_{i0}(\xi), \quad (2)$$

$$\tilde{Q}_{ij}^{mm'} = \begin{cases} Q_{ij}^{mm'} & t_{jm'}^{(h,k)} = b_{jm'} \\ Q_{ij}^{mm'} - \frac{n_j \sqrt{m_j}}{n_i \sqrt{m_i}} Q_{ij}^{mm'} \delta_{m0} \delta_{m'0} & t_{jm'}^{(h,k)} = a_{jm'}, c_{jm'}^{(h,k)} \end{cases}, \quad (8)$$

$Q_{ij}^{mm'}$ 是一系列方括号积分的函数, 其复杂程度和最终数值取决于体系内的粒子种类和粒子两两之间碰撞积分 $\Omega_{i,j}^{l,s}$ 的大小. l, s 的取值由 Sonine 多项式展开中的级数决定. $R_{im}^{(h,k)}, t_{j,m'}^{(h,k)}$ 表达式的对应关系可见表 1.

表 1 $R_{im}^{(h,k)}$ 表达式 [15]

$t_{j,m'}^{(h,k)}$	$R_{im}^{(h,k)}$
$a_{im'}$	$-\frac{15n_i}{2} \sqrt{\frac{kT}{2m_i}} \delta_{m1}$
$b_{im'}$	$-5n_i \delta_{m0}$
$c_{im'}^{(h,k)}$	$3\sqrt{\frac{kT}{2m_i}} (\delta_{ik} - \delta_{ih}) \delta_{m0}$

提高在 Sonine 多项式展开中引入近似的程度会提高输运参数计算结果的精度, 但无疑也会增加计算涉及的相互作用碰撞积分的种类数和求解线性方程组系统得到扩展系数的难度. 研究表明,

$$\eta(\xi) = \frac{kT}{2} \sum_j b_{j0}(\xi), \quad (3)$$

$$\lambda_{tr} = \lambda' + \frac{\rho k}{n} \sum_{i,j=1}^{\nu} \frac{E_{i,j} D_i^T D_j^T}{n_i m_i m_j}, \quad (4)$$

$$\lambda'(\xi) = -\frac{5}{4} k \sum_j n_j \sqrt{\frac{2kT}{m_i}} a_{i1}(\xi), \quad (5)$$

$$\sigma = \frac{e^2 n}{\rho k T} \sum_{j=1, j \neq e}^{\zeta} \left(n_j m_j Z_j D_{ej} - Z_j \sum_{i=1}^{\zeta} n_i m_i Z_i D_{ji} \right), \quad (6)$$

式中, m_i, n_i, Z_i 是电弧等离子体内部第 i 种粒子的分子质量、粒子数密度、电荷数; T, n, P, k 代表系统的温度、总的粒子数密度、压强和 Boltzmann 常数; $D_{ij}(\xi), D_i^T(\xi), \eta(\xi), \lambda_{tr}, \sigma$ 分别是正常扩散系数、热扩散系数、黏滞系数、平动热导率和电导率; $a_{i0}(\xi), c_{i0}^{j,i}(\xi), b_{j0}(\xi), a_{i1}(\xi)$ 是利用 Sonine 多项式对分布函数一阶微扰 ξ 级有限项展开中的展开系数. 通过求解以下线性方程组系统确定 (含有 $\nu\zeta + 1$ 个方程) [15]:

$$\sum_j \sum_{m'=0}^{\zeta-1} \tilde{Q}_{ij}^{mm'} t_{j,m'}^{(h,k)}(\zeta) = -R_{im}^{(h,k)}(\zeta), \quad (7)$$

其中, ν 是系统内粒子的种类数.

在 5000 K 以内, 涉及电子的正常扩散系数求解至少需要 Sonine 多项式的三级近似展开 [9]; 黏滞系数计算中 Sonine 多项式的一级近似展开在高温时能产生超过 10% 的偏差 [20], 而二级近似能满足工程应用对计算精度的要求 [21].

除了平动热导率 λ_{tr} , 反应热导率 λ_{re} 和内部热导率 λ_{in} 也需要考虑进热量传递的描述. Meador 和 Stanton [22] 给出了高温电离气体反应热导率的表达式; 而内部热导率采用 Hirschfelder-Eucken 近似得到 [23,24].

3 碰撞积分

获得粒子之间相互作用的碰撞积分是完成 Chapman-Enskog 方法求解的基础和前提, 而碰撞积分由粒子之间的相互作用势能积分得到, 反映

了位能函数对分布函数的影响,其精确度对运输参数的可信度有显著影响 [15]:

$$\Omega_{ij}^{(l,s)} = \sqrt{\frac{kT}{2\pi\mu_{ij}}} \int_0^\infty \exp(-\gamma_{ij}^2) \gamma_{ij}^{2s+3} Q_{ij}^l(g) d\gamma_{ij}, \quad (9)$$

$$Q_{ij}^l(g) = 2\pi \int_0^\infty (1 - \cos^l \chi) b db, \quad (10)$$

$$\chi = \pi - 2b \int_{r_m}^\infty \frac{dr/r^2}{\sqrt{1 - [\varphi_{ij}(r)/0.5\mu_{ij}g_{ij}^2] - (b^2/r^2)}}, \quad (11)$$

$$\gamma_{ij} = \sqrt{\frac{\mu_{ij}}{2kT}} g_{ij} \frac{1}{\mu_{ij}} = \frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j}, \quad (12)$$

$$1 - \frac{\varphi_{ij}(r)}{\frac{1}{2}\mu_{ij}g_{ij}^2} - \frac{b^2}{r_m^2} = 0, \quad (13)$$

其中, T 是温度, k 是 Boltzmann 常数, $\Omega_{ij}^{(l,s)}$, $Q_{ij}^l(g)$, γ_{ij} , μ_{ij} , m_i , m_j 分别是两个碰撞粒子 i 和 j 的 (l, s) 阶碰撞积分, (l) 阶碰撞截面, 相对初始速度、约化质量; χ 是碰撞粒子相对于重力坐标系中心的折射角度; $\varphi_{ij}(r)$ 是碰撞粒子之间的相互作用势, b 是碰撞参数, r_m 是方程 (13) 的最小正根.

空气的主要成分为氮气 (78.084%)、氧气 (20.942%)、氩 (0.934%). 忽略痕量粒子的影响, 本文考虑了 18 种粒子: $N_2, N, N_2^+, N^+, N^{++}, N^{+++}, O_2, O_2^+, O^+, O^{++}, O^{+++}, NO, NO^+, Ar, Ar^+, Ar^{++}, Ar^{+++}$ 和电子 e . 基于最新的粒子相互作用势研究结果, 粒子之间相互作用的 171 个碰撞积分采用不同的方法获得.

3.1 中性粒子之间的相互作用

表 2 总结了空气电弧等离子体中性粒子之间碰撞积分的计算方法和作用势的数据来源.

对 $N_2-N_2, N_2-N, N-N, O_2-O_2, O_2-O$ 和 $O-O$ 作用, 借助量子化学精确计算得到的势能曲线, 其碰撞积分已经通过列表给出, 本文直接应用 [25-27].

文献 [28, 29] 根据分子动力学理论利用反转法得到了 $O_2-O_2, NO-NO$ 和 N_2-O_2 之间的作用势, 并用最小二乘法分别拟合 HFD-B LIKE 和 MSV 势能函数得到势能参数, 以此为基础计算得到的黏滞系数、导热系数与实验值一致性非常好.

对 $Ar-Ar$ 作用, 我们利用 Slavíček 最小二乘法拟合量子化学计算结果得到的 HFD-B 作用势来计算其碰撞积分, 该相互作用势和光谱数据非常符合, 具有特别高的精确度 [30].

表 2 中性粒子之间相互作用的碰撞积分

相互作用	方法	来源
N_2-N_2	碰撞积分列表	[25]
N_2-N	碰撞积分列表	[26]
$N-N$	碰撞积分列表	[27]
O_2-O_2	HFD-B LIKE 势	[28]
O_2-O	碰撞积分列表	[26]
$O-O$	碰撞积分列表	[27]
N_2-O_2	MSV 势	[29]
N_2-O	Buckingham-Corner 势	[34]
$NO-NO$	HFD-B LIKE 势	[28]
$N-O$	碰撞积分列表	[27]
$Ar-Ar$	HFD-B 势	[30]
N_2-Ar	ESMSV 势	[32]
O_2-Ar	ESMSV 势	[33]
$O-Ar$	Exponential 势	[35]

表 3 中性粒子的极化率和数据来源

粒子	极化率/ \AA^3	数据来源
Ar	1.64	[39]
N_2	1.76	[40]
O_2	1.60	[40]
NO	1.74	[40]
N	1.10	[41]
O	0.77	[41]

对 N_2-Ar 和 O_2-Ar 的作用势, 本文根据 Wright 的推荐 [31], 采用文献 [32,33] 的研究成果, 用 ESMSV 势能函数表达. 该作用势用三次样条函数分段连接不同粒子距离区间上的解析势, 在全程都具有较高的精度.

N_2-O 作用的碰撞积分由 Buckingham-Corner 势得到 [34]. ArO 分子光谱态 $^3\Pi, ^3\Sigma^-$ 对应的势能曲线用最小二乘法拟合两个 Exponential 势; $O-Ar$ 的碰撞积分通过对两者数值计算得到的碰撞积分统计平均得到 [35].

涉及空气电弧等离子体体系内中性粒子的其他 7 个相互作用, 本文用 Phenomenological 势来表达 [36,37], 该作用势是 Lennard-Jones 势的提高和完善. 研究表明, Phenomenological 势能比较准确地重现量子化学 *ab initio* 计算的势能结果 [38]. 该势能函数的参数由粒子的结构 (有效电子数、自旋多重度等) 和极化率决定. 本文涉及的中性粒子的极化率数值和数据来源见表 3.

3.2 离子与中性粒子之间的相互作用

离子与中性粒子有两种不同类型的作用, 一是弹性碰撞, 二是有电荷转移的非弹性碰撞, 两者通过下列表达式结合在一起 [42]:

$$\Omega^{(l,s)} = \sqrt{(\Omega_{in}^{(l,s)})^2 + (\Omega_{ec}^{(l,s)})^2}, \quad (14)$$

其中, in, ec 代表非弹性碰撞和弹性碰撞.

对弹性碰撞过程, 中性粒子和离子之间的碰撞积分采用不同的方法计算得到. 非弹性碰撞的碰撞截面可以通过实验和理论计算由下式得到 [42]:

$$Q^l(g) = 2Q_{ex},$$

$$Q_{ex} = (A - B \ln E)^2, \quad (15)$$

其中, E 是碰撞能量, A, B 是由实验或者计算确定的常数. 中性粒子与异核一阶离子 $X-Y^+$ ($X \neq Y$) 之间以及中性粒子与其高阶离子 $X-X^{n+}$ ($n \geq 2$) 之间电荷转移的非弹性碰撞对碰撞积分的影响非常小, 可以忽略.

$O-O^+$, $N-N^+$, $N-O^+$, $O-N^+$ 的弹性碰撞积分和电荷转移的非弹性碰撞积分已经通过精确的量子化学计算列表给出 [43].

对 $Ar-Ar^+$ 作用, Ar_2^+ 6 个分子态 $^2\Sigma_{1/2u}$, $^2\Sigma_{1/2g}$, $^2\Pi_{3/2g}$, $^2\Pi_{3/2u}$, $^2\Pi_{1/2g}$, $^2\Pi_{1/2u}$ 对应的势能曲线拟合 Morse 势 (束缚态) 和 Exponential 势 (非束缚态), 势能参数由文献 [44] 得到. 同样的方法和参数来源也应用于 $O-Ar^+$ 作用的弹性碰撞积分, 对后者, 本文考虑了 $ArO^+ \rightleftharpoons O+Ar^+$ 反应对应的 8 个分子态 $^2\Sigma$, $^1^2\Pi$, $^3\Sigma$, $^1^4\Pi$, $^2^4\Pi$, $^4\Sigma$, $^4\Delta$, $^2\Delta$. $Ar-Ar^+$ 电荷转移的非弹性碰撞截面通过最小二乘法对文献 [45] 的理论计算值拟合式 (15) 得到.

对 $Ar-O^+$, $Ar-N^+$, $N-Ar^+$, $O-Ar^+$ 作用的弹性碰撞积分, 利用量子化学计算得到的 ArO^+ 和 ArN^+ 分子势能曲线 [46,47] 被用来拟合 Murrell-Sorbie 势 (束缚态) 和 Exponential 势 (非束缚态). 相应的分子光谱态分别为 $Ar-O^+$: $^4\Sigma^-$; $N-Ar^+$, $C^3\Sigma^-$, $B^3\Pi$; $Ar-N^+$: $X^3\Sigma^-$, $A^3\Pi$.

对其他中性粒子和一阶离子之间的弹性碰撞积分, 本文用 Phenomenological 势数值计算得到, 离子的极化率和数据来源见表 4. $NO-NO^+$, $N_2-N_2^+$, $O_2-O_2^+$ 电荷转移的非弹性碰撞截面通过最小二乘法对渐近理论计算结果 [52] 拟合得到.

高阶离子的极化率数值在不同文献中分散性较大, 因此, 本文用极化势模型来计算中性粒子和

相应离子作用的碰撞积分 [53]:

$$\varphi_{in}(r) = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{(Z_i e)^2 \alpha_n}{2r^4}, \quad (16)$$

其中, $\epsilon_0, Z_i, \alpha_n, r$ 分别是静电常数、离子电荷数、中性粒子的极化率以及粒子相互作用的距离.

表 4 离子的极化率和数据来源

粒子	极化率/ \AA^3	数据来源
Ar^+	1.066	[48]
NO^+	1.02	[49]
N_2^+	1.75	[50]
O_2^+	0.80	[50]
N^+	0.523	[51]
O^+	0.377	[51]

3.3 电子与中性粒子之间的相互作用

电子与中性粒子之间的碰撞积分通过 (9) 式对各阶碰撞截面 $Q^l(E)$ 直接数值积分得到; 而后者由微分碰撞截面 $d\sigma/d\Omega$ 积分得到:

$$Q^l(E) = \int_0^\pi (d\sigma/d\Omega) \sin\theta (1 - \cos\theta)^l d\theta. \quad (17)$$

对 $e-Ar$ 作用, 文献 [54] 给出了电子碰撞的微分碰撞截面数值, 本文由 (17) 式直接积分得到各阶碰撞截面.

$e-O_2$ 作用的微分碰撞截面数据在低能区间 (1 eV 以下) 尚没有文献报道. Itikawa 给出了一组动量转移碰撞截面 $Q^1(E)$ 的推荐值 (0.01—100 eV) [55], 在此能量区间内 $Q^2(E)$, $Q^3(E)$ 与 $Q^1(E)$ 的比值通过对文献 [56—58] 的微分碰撞积分得到, 并利用 $Q^2(E)/Q^1(E)$, $Q^3(E)/Q^1(E)$ 在 $E = 0$ 时的极限值外推到低能量的 0.01 eV; 高于 100 eV 时, 文献 [59] 微分碰撞截面的理论计算值通过 (17) 式数值积分得到各阶碰撞截面.

对 $e-N_2$ 作用, 本文利用 Tabata 的动量转移碰撞截面推荐值 [59], 借助文献 [60, 61] 的微分碰撞截面计算得到 $Q^2(E)$, $Q^3(E)$ 与 $Q^1(E)$ 的比值, 获得各阶碰撞截面, 并将其从 0.55 eV 外推到 0.01 eV.

对 $e-NO$ 作用, 动量转移碰撞截面来自 Hayashi [62]; $Q^2(E)/Q^1(E)$, $Q^3(E)/Q^1(E)$ 通过对文献 [63] 的微分碰撞截面积分得到.

Williams $e-O$ 微分碰撞截面的实验值 (0.54, 2.18, 3.4, 4.9, 8.71 eV) [64] 和 Thomas 在 11 eV [65],

Blaaha 在 高能 区间 (15—500 eV) 的 理论 值 互 为 补 充 [66], 由 (23) 式 直 接 积 分 得 到 各 阶 碰 撞 截 面; 更 低 能 级 区 间 的 各 阶 碰 撞 截 面 由 Itikawa 推 荐 的 动 量 转 移 碰 撞 截 面 [67] 结 合 外 推 得 到 的 $Q^2(E)/Q^1(E)$, $Q^3(E)/Q^1(E)$ 比 值 求 得.

3.4 带电粒子之间的相互作用

带电粒子之间的作用势采用屏蔽的 Coulomb 电势:

$$\varphi_{ij}(r) = \frac{Z_i Z_j e^2}{r^2} \exp\left(-\frac{r}{\lambda_D}\right), \quad (18)$$

其中, Z_i, Z_j 分别是带电粒子 i, j 的电荷数, λ_D 是等离子体的 Debye 长度, 并仅考虑电子对电场的屏蔽作用; 其碰撞积分利用文献 [68, 69] 的结果得到.

4 结果与讨论

由于空气电弧等离子体在各个领域的广泛应用, 有大量文献涉及其物性参数的理论研究以及不同计算结果的比较分析. 本文仅与较近的 Murphy^[12] 和 Capitelli^[13,14] 的结果进行了对比, 给出了不同气压 (0.1—20 atm), 不同温度 (300—30000 K) 区间的运输参数计算结果, 可以满足绝大多数工程的应用.

4.1 扩散系数

扩散系数与粒子的质量转移相关, 其中正常扩散系数、热扩散系数分别与体系中浓度梯度和温度梯度影响下产生的粒子迁移相关. 文献中空气电弧等离子体扩散系数数据的报道较少, 仅有 Capitelli^[13] 分别采用 Sonine 多项式一级和二级近似展开得到了正常扩散系数和热扩散系数的表达式, 并只报道了电子热扩散系数的计算值; 而本文对正常扩散系数和热扩散系数都采用 Sonine 多项式三级展开, 具有更高的精度. 计算表明, 两种近似表达得到的扩散系数偏差较大, 例如 1 个大气压条件下电子的热扩散系数, 利用二级与三级近似得到的结果的相对偏差在 7500, 15000 和 30000 K 时的值分别为 35.68%, 10.46%, 7.87%.

图 1 给出了空气电弧等离子体中电子与重粒子 N_2 分子的热扩散系数随温度和气压变化的规律以及标准大气压条件下, 电子热扩散系数

与 Capitelli^[13] 计算结果的比较.

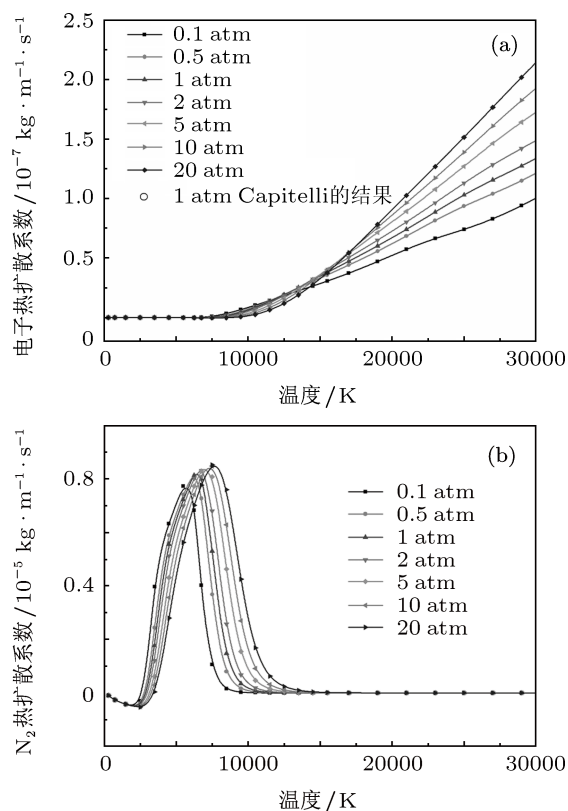


图 1 不同气压条件下空气电弧等离子体热扩散系数 (a) 电子; (b) N_2

局域热力学平衡假设下, 所有粒子的质量转移净通量为零, 电弧等离子体内部粒子的热扩散系数遵循对称原理, 即所有粒子的热扩散系数之和也为零. 粒子热扩散系数的符号决定了不等温的温度场作用下, 均匀 (不存在浓度梯度) 混合物中粒子迁移的方向: 负的热扩散系数表征粒子迁移的方向和温度梯度的方向一致, 正的热扩散系数则表示粒子迁移方向和温度梯度方向相反 [15].

由热扩散的计算表达式 (2) 可知, 粒子的热扩散系数和温度、粒子的数密度以及系数 $a_{i0}(\xi)$ 相关, 而后者又和不同粒子之间的相互作用势有关. 温度 14000 K 以下, 在给定的温度条件下, 气压的升高使电子的热扩散系数下降; 14000 K 以上, 在给定的温度条件下, 空气电弧内部电子的热扩散系数随着气压上升而变大. 同一气压条件下, 空气电弧等离子体中, 相比电子热扩散系数的单调上升, 重粒子 N_2 分子的热扩散系数呈现峰值特征.

标准大气压条件下, 在 2500 K 以下, 空气的各个组分尚未分解, 微量成分氩气对热扩散系数的影响很小, 空气可以近似为氮气和氧气的二元混合物, N_2, O_2 分子的热扩散系数数值大致相等, 符号相反,

N_2 分子热扩散的方向和温度梯度的方向一致. 随着 O_2, N_2 分子开始分解, 粒子的浓度和粒子之间的相互作用势发生变化, N_2 的热扩散系数从负值变为正值, 并随温度增加先升后降, 当分解完成时, N_2 分子的热扩散系数受自身浓度降低的影响降至为零. 在此温度区间, 气压的升高使 N_2 分子热扩散系数曲线峰值的位置 (对应 N_2 分子的分解温度) 向更高的温度推移, 同时峰值也相应地变大.

相比之下, Capitelli 电子热扩散系数的理论计算值比本文的大, 两者的差别随着温度的升高而增大, 除了数值求解中 Sonine 多项式展开级数差别带来的输运参数结果的差距以及考虑的粒子种类不同 (Capitelli 忽略氩气的影响), 两者的差别主要归结于粒子碰撞积分特别是电子和中性粒子, 以及带电粒子之间碰撞积分的不同. Capitelli 等将重离子也考虑进对电场屏蔽作用的 Debye 长度, 导致带电粒子之间的碰撞积分比本文的小, 相应的电子热扩散系数比本文的高, 而本文处理属于通用的做法 [70].

4.2 黏滞系数

黏滞系数是描述电弧流体内摩擦力性质的一个重要物理量. Murphy 和 Capitelli 对黏滞系数采用 Sonine 多项式的一级近似展开, 本文采用二级展开. 在气体电离之前, 其黏滞系数主要由中性粒子之间的碰撞积分决定, 后者随着温度升高逐渐下降, 相应地, 黏滞系数在不断上升, 电离发生后, 由于带电粒子之间的碰撞积分要比中性粒子之间, 以及中性粒子与带电粒子之间的碰撞积分大几个数量级, 随着带电粒子浓度的不断增加, 黏滞系数逐渐下降.

由图 2 所示, 标准大气压条件下本文空气电弧等离子体的黏滞系数与 Murphy, Capitelli 的计算总体上一致. 特别是对应电离度较高的高温区间, 排除 Sonine 多项式展开级数不同带来的偏差, 本文跟 Murphy 的结果非常符合, 这是因为两者对 Debye 长度的处理方法相同, 带电粒子 Coulomb 作用的碰撞积分一致; 而 Capitelli 的结果略高, 原因和电子热扩散系数的解释类似. 黏滞系数的峰值主要与 N, O 原子及其一阶离子之间相互作用的碰撞积分相关. 对这些数据, 本文和 Murphy 的研究都是利用量子化学计算的结果, 数据来源相同, 因此黏滞系数峰值大小几乎相同.

在低温区间, 本文的结果比 Murphy 和 Capitelli 的数据略低, 这是由于他们低估了含氮粒子相互作

用的碰撞积分 (主要是 N_2-N_2, N_2-N, N_2-O_2). 而本文采用由量子化学计算或者由实验数据利用反转法得到的数据, 可靠性更高.

在对应电离反应发生的高温区间, 给定温度条件下, 根据 Le Chatelier 原理, 气压的升高抑制了电离反应的进行, 带电粒子 Coulomb 势的影响减弱, 因此, 体系的黏滞系数升高.

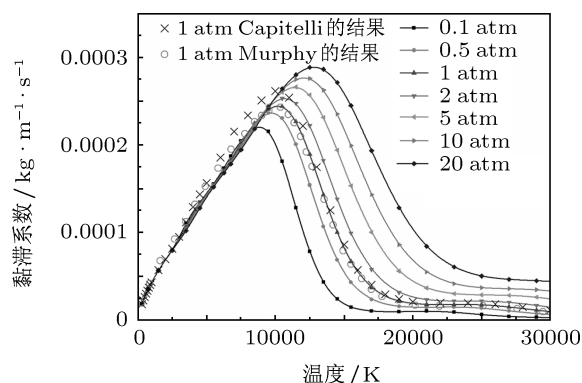


图 2 不同气压条件下空气电弧等离子体黏滞系数

表 5 黏滞系数相对偏差 $\varepsilon(\eta)(\%)$

温度/K	$P = 0.1 \text{ atm}$	$P = 1 \text{ atm}$	$P = 10 \text{ atm}$
300	0.26	0.26	0.26
750	0.62	0.62	0.62
1000	0.64	0.64	0.64
3000	0.58	0.56	0.56
5000	0.55	0.58	0.59
8000	0.32	0.31	0.39
10000	0.92	0.37	0.26
12500	1.81	1.37	0.44
15000	3.83	2.24	1.40
20000	9.15	6.44	3.42
25000	10.73	8.89	6.29
30000	10.36	9.83	7.88

为了研究 Sonine 多项式展开级数对黏滞系数数值计算精度的影响, 表 5 给出了不同气压条件下 ($P = 0.1 \text{ atm}, 1 \text{ atm}, 10 \text{ atm}$), Sonine 多项式一级展开与二级展开之间的相对偏差.

$$\varepsilon(\eta) = \frac{\eta(3) - \eta(2)}{\eta(3)} \times 100\%, \quad (19)$$

可以看出, 在气压比较低的情况下, 黏滞系数 Sonine 多项式展开的一级近似在高温条件下具有较大的偏差.

4.3 热导率

热导率表征材料直接传导热量的能力. 图 3

给出了标准大气压条件下, 空气电弧等离子体热导率各分量随温度变化的曲线以及与 Murphy 和 Capitelli 理论计算的比较. 在他们的研究中, 热导率的计算采用文献 [17] 忽略电子与重粒子相互作用得到的简化表达, 对电子和重粒子区别对待: 对电子采用 Sonine 多项式的三级展开表达, 对重粒子采用二级展开; 本文则是利用非简化理论、完整的三级展开得到体系的总平动热导率, 仅在求解电子与重粒子平动热导率分量时采用简化表达, 并且都采用 Sonine 多项式三级展开的表达. 研究表明, 基于同样的碰撞积分, 两种处理方法得到的平动热导率的误差最大不超过 1%.

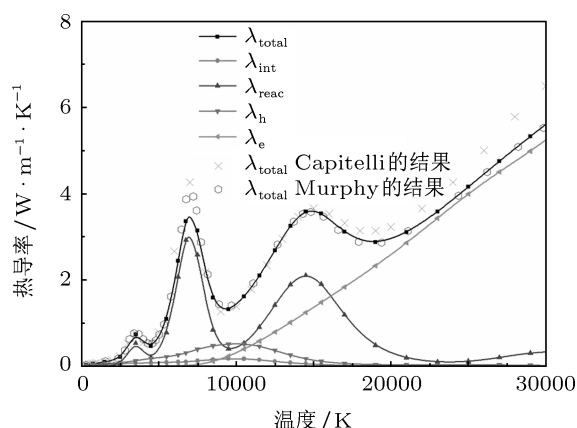


图 3 1 atm 条件下空气电弧等离子体热导率各分量 λ_{total} , 总热导率; λ_{int} , 内部热导率; λ_{reac} , 反应热导率; λ_e , 电子平动热导率; λ_h , 重粒子平动热导率

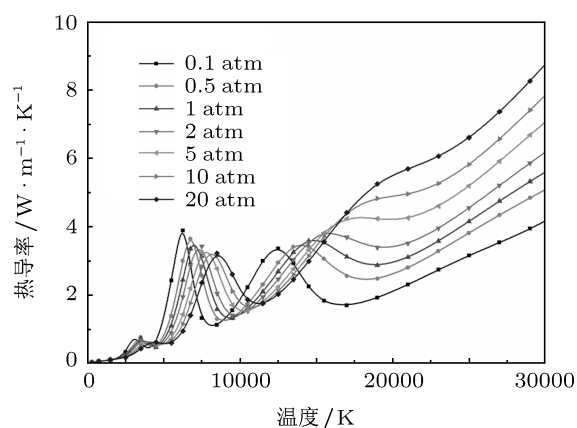


图 4 不同气压条件下空气电弧等离子体热导率

分解、电离等化学反应对热导率曲线的形状和峰值有显著影响. 总热导率以及反应热导率的峰值分别对应不同的化学反应: 前三个峰值, 分别和氧分子的解离、氮分子的解离和氮氧原子的电离相关. 氮气和氧气的解离能差别很大, 反应热导率曲线上区分明显, 氮原子与氧原子的电离能差别不

大, 与一阶电离相关的热导率峰值叠加在一起. 体系中氩气的比例很小, 又是单原子气体, 它的电离反应对反应热导率的贡献不明显.

空气电弧等离子体热导率随气压的变化规律由图 4 给出. 气压的升高抑制了解离、电离反应, 使得热导率峰值被相应地推迟到更高的温度出现. 同时, 随着体系气压的升高, 相同温度下平动热导率数值显著升高, 电离反应对应的峰值变得不再明显.

4.4 电导率

电导率和电弧等离子体内部的电荷转移相关, 由 Sonine 多项式一级展开得到的电导率表达式 (20) 可知电导率对电子粒子数密度和电离度有强烈的依赖关系:

$$\sigma(1) = 3e^2 n_e / \left(8\sqrt{2\pi k T m_e} \sum_{j \neq e}^{\nu} n_j \bar{\Omega}_{e,j}^{(1,1)} \right). \quad (20)$$

如图 5 所示, 低温情况下 (5000 K 以内), 空气的电离度和电子粒子数密度比较低, 因此电导率很低. 随着电离反应的进行, 前者不断升高, 电导率上升到达到一个峰值; 一级电离反应进行得比较充分时, 温度的继续升高使得电弧等离子体内部电子的粒子数密度降低, 在二级电离反应之前, 电导率有所下降.

相比 Murphy, Capitelli 的计算结果, 本文和前者一致性较好, 和后者有较大偏差. 同样是应用 Sonine 多项式三级展开, 高温区间结果的差异主要归结于带电粒子 Coulomb 作用碰撞积分的 Debye 长度的不同对待方法. 在低温区间, 本文的电导率与 Murphy, Capitelli 数据的微小偏差来源于采用了不同的电子与中性粒子碰撞积分. 此外, Murphy 用电子碰撞的动量碰撞截面 $Q_{ij}^1(g)$ 代替各阶碰撞截面的近似估计也是偏差出现的原因.

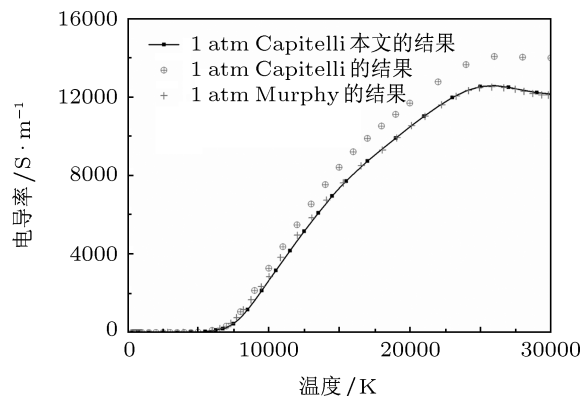


图 5 1 atm 条件下空气电弧等离子体电导率

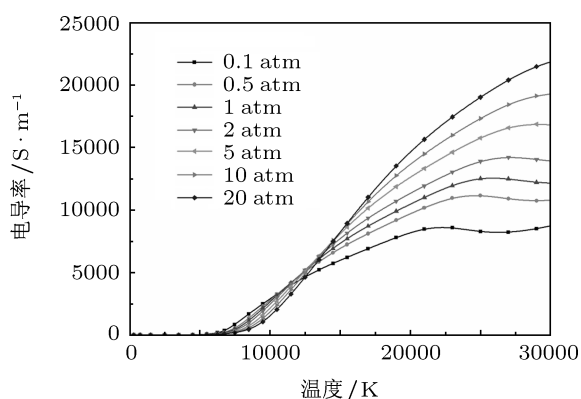


图6 不同气压条件下空气电弧等离子体电导率

气压对电导率的影响如图6所示。12000 K以下,在给定温度条件下,空气电弧的电导率随着气压上升反而下降;12000 K以上电导率随着气压上升而变大。这是因为在较低的温度区间,虽然气压升高使电子数密度增大,却抑制了电离反应,使得体系的电离度下降, $3e^2 n_e / \sum_{j \neq e} n_j \bar{\Omega}_{e,j}^{(1,1)}$ 的比值变小;在较高的温度区间,体系的电离度已经很高,中性粒子的比例很小,电导率的数值主要由电子数密度决定,气压升高增加了相同温度下的电子数密度,体系的电导率变大。

5 结论

文章基于局域热力学平衡态假设,采用最新的粒子相互作用势研究成果,给出了不同气压条件下(0.1—20 atm),300—30000 K范围内空气电弧等离子体的输运参数,并与以前文献的结果进行了比较分析。

(1) 利用Chapman-Enskog理论, Sonine多项式三级(黏滞系数用二级)展开表达式被应用于空气电弧等离子体输运参数的数值求解,提高了计算结果特别是扩散系数、黏滞系数的精度。

(2) 不同来源的相互作用势得到的碰撞积分的差别是造成输运参数计算结果出现偏差的主要原因。本文基于精确的量子化学计算、反转法、Phenomenological势等最新的相互作用势研究成果和电子与中性粒子碰撞截面数据,更新了空气电弧等离子体涉及粒子之间的碰撞积分,因此,输运参数具有更高的可信度。

(3) 气压的升高抑制了解离、电离反应的进行,对空气电弧等离子体的输运特性有重要影响。

(4) 文中计算得到的空气电弧等离子体输运参数,为工程应用的仿真研究提供了更为精确的微观理论基础和参数依据。

- [1] Gong J Q, Gong Y, Liu J Y, Zhang P Y 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 291 (in Chinese) [宫继全, 宫野, 刘金远, 张鹏云 2002 物理学报 **51** 291]
- [2] Rong M Z, Wu Y, Fei Y, Sun Z Q, Wang W Z, Wang X H 2008 *Proceeding of the XVII International Conference on Gas Discharges and Their Applications* Cardiff, UK
- [3] Wu Y, Rong M Z, Yang F, Murphy A B, Ma Q, Sun Z Q, Wang X H 2008 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **36** 1074
- [4] Wu Y, Rong M Z, Yang F, Wang X H, Ma Q, Wang W Z 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 5761 (in Chinese) [吴翊, 荣命哲, 杨飞, 王小华, 马强, 王伟宗 2008 物理学报 **57** 5761]
- [5] Rong M Z, Wu Y, Yang F, Murphy A B, Wang W Z, Guo J 2010 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **38** 2306
- [6] Yang F, Rong M Z, Wu Y, Shi Q, Liu Z C, Ma R G, Chen S 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 055208 (in Chinese) [杨飞, 荣命哲, 吴翊, 史强, 刘增超, 马瑞光, 陈胜 2011 物理学报 **60** 055208]
- [7] Wang W Z, Rong M Z, Murphy A B, Wu Y, Su H B, Yang F 2010 *High Voltage Engineering* **36** 2777 (in Chinese) [王伟宗, 荣命哲, Murphy A B, 吴翊, 苏海博, 杨飞 2010 高电压技术 **36** 2777]
- [8] Zheng J, Gu Y J, Chen Q F, Chen Z Y 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 7472 (in Chinese) [郑君, 顾云军, 陈其峰, 陈志云 2010 物理学报 **59** 7472]
- [9] Fauchais P, Boulos M I, Pfender E 1994 *Thermal Plasmas—Fundamentals and Applications* (Vol. 1) (New York: Plenum) p213
- [10] Schreiber P W, Hunter A M, Benedetto K R 1973 *AIAA J.* **11** 2696
- [11] Bacri J, Raffanel S 1989 *Plasma Chem. Plasma Process.* **9** 133
- [12] Murphy A B 1995 *Plasma Chem. Plasma Process.* **15** 279
- [13] Capitelli M, Colonna G, Gorse G, Angola A D 2000 *Eur. Phys. J. D* **11** 279
- [14] Capitelli M, Colonna G, Gorse G, Angola A D 2008 *Eur. Phys. J. D* **46** 129
- [15] Hirschfelder J O, Curtis C F, Bird R B 1964 *Molecular Theory of Gases and Liquids* (2nd Ed.) (New York: Wiley)
- [16] Chapman S, Cowling T G 1970 *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases* (3rd Ed.) (Cambridge: Cambridge University Press)
- [17] Devoto R S 1967 *Phys. Fluids* **10** 2105
- [18] Devoto R S 1966 *Phys. Fluids* **9** 1230
- [19] Rat V, Andre' P, Aubreton J, Elchinger M F, Fauchais P, Lefort A 2002 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **35** 981
- [20] Devoto R S 1973 *Phys. Fluids* **16** 616
- [21] Devoto R S 1967 *Phys. Fluids* **10** 2704
- [22] Meador W E, Stanton L D 1965 *Phys. Fluids* **8** 1694
- [23] Monchick L, Yun K S, Mason E A 1963 *J. Chem. Phys.* **39** 654
- [24] Hirschfelder J O 1957 *Chem. Phys.* **26** 282

- [25] Stallcop J R, Partridge H, Levin E 2000 *Phys. Rev. A* **62** 062709
- [26] Stallcop J R, Partridge H, Levin E 2000 *Phys. Rev. A* **64** 042722
- [27] Levin E, Partridge H, Stallcop H R 1990 *J. Thermophys. Heat Transfer* **4** 469
- [28] Abbaspour M, Goharshadi E K, Emampour J S 2006 *Chem. Phys.* **326** 620
- [29] Ali M, Amir H J 2004 *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **77** 1297
- [30] Slavíček P, Kalus R, Paška P 2003 *J. Chem. Phys.* **119** 2102
- [31] Wright M J, Levin E 2005 *J. Thermophys. Heat Transfer* **19** 127
- [32] Brunetti B, Liuti G, Luzzatti E, Pirani F, Volpi G G 1983 *J. Chem. Phys.* **79** 273
- [33] Pirani F, Vecchiocattivi F 1981 *Chem. Phys.* **59** 387
- [34] Brunetti B, Liuti G, Luzzatti E, Pirani F, Vecchiocattivi F 1981 *J. Chem. Phys.* **74** 6734
- [35] Aubreton J, Bonnefoi C, Mexmain J M 1986 *Rev. Phys. Appl.* **21** 365
- [36] Capitelli M, Cappelletti D, Colonna G, Gorse C, Laricchiuta A, Liuti G, Longo S, Pirani F 2007 *Chem. Phys.* **338** 62
- [37] Laricchiuta A, Colonna G, Bruno D, Celiberto R, Gorse C, Pirani F, Capitelli M 2007 *Chem. Phys. Lett.* **445** 133
- [38] Andrea L, Federico P 2008 *J. Mol. Struct. (Theochem)* **857** 22
- [39] Lupinetti C, Thakkar A J 2005 *J. Chem. Phys.* **122** 044301
- [40] Duijnen P T V, Swart M 1998 *J. Phys. Chem. A* **102** 2399
- [41] Das A K, Thakkar A J 1998 *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **31** 2215
- [42] Murphy A B, Arundell C J 1994 *Plasma Chem. Plasma Process.* **14** 451
- [43] Stallcop J R, Partridge H, Levin E 1991 *Chem. Phys.* **95** 6429
- [44] Aubreton J, Bonnefoi C, Mexmain J M 1986 *J. Appl. Phys. Rev.* **21** 365
- [45] Barata J A S 2007 *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. A* **580** 14
- [46] Danailov D M, Viehland L A, Johnsen R, Wright T G, Dickinson A S 2008 *J. Chem. Phys.* **128** 134302
- [47] Broström L, Larsson M, Mannervik S, Sonneka D 1991 *J. Chem. Phys.* **94** 2734
- [48] Meier P, Sandemant R J, Andrews M 1974 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **7** L339
- [49] Me'rawa M, Be'gue' D, Pouchan C 2003 *J. Mol. Str. (Theochem)* **633** 157
- [50] Sourd B, Aubreton J, Elchinger M F, Labrot M, Michon U 2006 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **39** 1105
- [51] Thakkar A, Das A K 2001 *J. Mol. Str. (Theochem)* **547** 233
- [52] Yevseyev A V, Radtsig A A, Smirnov B M 1982 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **15** 4437
- [53] Kihara T, Taylor M H, Hirschfelder J O 1960 *Phys. Fluids* **3** 715
- [54] Mehrdad A, Constantine E T 2005 *Atom. Data Nucl. Data Tables* **91** 8
- [55] Itikawa Y 2009 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **38** 1
- [56] Sullivan J P, Gibson J C, Gulley R G, Buckman S J 1995 *J. Phys. B* **28** 4319
- [57] Linert I, King G C, Zubek M 2004 *J. Phys. B* **37** 4681
- [58] Machado L, Ribeiro E M S, Lee M T, Fujimoto M M, Brescansin L M 1999 *Phys. Rev. A* **60** 1199
- [59] Tabata T, Shirai C T, Sataka M, Kubo H A 2006 *Atom. Data Nucl. Data Tables* **92** 375
- [60] Muse J, Silva H, Lopes M C A, Khakoo M A 2008 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **41** 095203
- [61] Gote M, Ehrhardt H 1995 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28** 3957
- [62] Hayashi M 1989 *NATO ASI Series B* **220** 333
- [63] Mojarrabi M, Gulley R J, Middleton A G, Cartwright D C, Teubner P J O, Buckman S J, Brunger M J 1995 *J. Phys. B* **28** 487
- [64] Williams J F, Allen L J 1989 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **22** 3529
- [65] Thomas L D, Nesbet R K 1975 *Phys. Rev. A* **12** 1729
- [66] Blaha M, Davis J 1975 *Phys. Rev. A* **12** 2319
- [67] Itikawa Y, Ichimura A 1990 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **19** 637
- [68] Mason E A, Munn R J 1967 *Phys. Fluids* **10** 1827
- [69] Devoto R S 1973 *Phys. Fluids* **16** 616
- [70] Murphy A B 2001 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **34** 151

Theoretical computation studies for transport properties of air plasmas*

Wang Wei-Zong¹⁾²⁾ Wu Yi^{1)†} Rong Ming-Zhe¹⁾ Yang Fei¹⁾

1) (*School of Electrical Engineering, Xi'an Jiaotong University, State Key Laboratory of Electrical Insulation and Power Equipment, Xi'an 710049, China*)

2) (*Department of Electrical Engineering and Electronics, The University of Liverpool, Brownlow Hill, Liverpool L69 3GJ, UK*)

(Received 6 June 2011; revised manuscript received 26 August 2011)

Abstract

The thermophysical properties of arc plasma provide reliable micro-theoretical foundations and parameter inputs for the numerical simulation of the air arc discharge process. Based on the assumption of the local thermodynamic equilibrium, the computation of transport properties including electron diffusion coefficient, viscosity, thermal conductivity and electrical conductivity is performed by using the Chapman-Enskog method and expanding the sonine polynomial up to the third-order approximation (second-order for viscosity) in a pressure (0.1—20 atm) and temperature range (300—40000 K) conditions which satisfy most thermal plasma modelling requirements. The most recent data on potential interactions and elastic differential cross sections for interacting particles are utilized to determine the collision integrals, resulting in more accurate and reliable values of transport properties than those given in the previous literature.

Keywords: air plasmas, transport properties, Chapman-Enskog theory, collision integrals

PACS: 52.25.Fi

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51177124), the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51007072), and the Ph.D. Programs Foundation of Ministry of Education of China (Grant No. 20110201130006).

† E-mail: wuyic51@mail.xjtu.edu.cn