

双温度氦等离子体输运性质计算*

王海兴[†] 孙素蓉 陈士强

(北京航空航天大学, 宇航学院, 北京 100191)

(2011 年 11 月 14 日收到; 2012 年 2 月 20 日收到修改稿)

获得覆盖较宽温度和压力范围内的等离子体输运性质是进行等离子体传热和流动过程数值模拟的必要条件. 本文采用 Saha 方程计算等离子体组分, 采用基于将 Chapman-Enskog 方法扩展到高阶近似的方法, 计算获得了电子温度 (T_e) 不等于重粒子温度 (T_h) 的情形下, 在 300 K 到 40000 K 的温度范围内氦等离子体的黏性、热导率和电导率. 研究结果表明压力和热力学非平衡参数 ($\theta = T_e/T_h$) 对氦等离子体的输运性质有较大的影响. 在局域热力学平衡条件下, 计算获得的氦等离子体输运性质和文献报道的数据符合良好.

关键词: 氦等离子体, 输运性质, 热力学非平衡

PACS: 52.25.Fi, 51.10.+y, 51.20.+d

1 引言

氦气作为等离子体形成气体在工业生产、航空航天领域有着广泛的应用. 在等离子体材料加工过程中, 通常采用按照一定比例混合的氩-氦或氩-氦-氢混合物作为工作气体. 例如在等离子体喷涂过程中, 由于氩等离子体导热系数小、焓值低, 因而氩等离子体射流向被喷涂颗粒的传热量小, 导致在纯氩等离子体射流中的大部分颗粒在到达被喷涂基板前尚未完全熔化, 从而影响涂层的质量. 所以实际喷涂过程中, 通常在氩气中添加一定比例的氦气以提高等离子体射流的焓值和导热系数, 以改善颗粒的加热环境^[1,2]. 在航天推进领域, 由于氦等离子体焓值高, 原子质量小, 作为电弧加热发动机的工作气体, 能使发动机获得较高的比冲^[3]. 在氦气的上述应用中的某些情形下, 一些研究表明, 氦等离子体可能处于热力学非平衡状态, 即电子温度不等于重粒子温度的情形^[4]. 例如在电极区附近、等离子体射流的边缘、以及低气压情形等. 因此, 获得氦等离子体在较大温度和压力范围内的双温度热力学和输运性质是对上述传热、流动以及非平衡过程进行分析和数值模拟前提条件.

氦气是结构简单的单原子气体, 在气体温度升高时不用经过解离阶段, 因此相比其他气体, 氦原子和其他粒子的相互作用势和碰撞截面可以更加准确地获得, 因而氦等离子体物性的计算吸引了很多学者的关注. 但是先前报道的关于氦等离子体的物性数据, 大多是局域热力学平衡条件下的计算结果^[5,6], 或以混合气体的形式给出^[1,2]. 在双温度情形下, 电子温度不等于重粒子温度, 这种偏离热力学平衡的程度会对等离子体的组分、热力学和输运性质产生不同程度的影响; 同时随着压力的变化, 气体中电离复合反应的温度区间、各种组分的数密度也会发生变化, 从而对等离子体的输运性质也会产生较大的影响. 另外, 目前文献报道的等离子体物性数据的温度范围大都在 300 K 到 30000 K 之间^[1,2,5,6], 而在一些高电流、大功率的等离子体应用中, 气体温度有可能超出这个范围, 因此在本文的研究中, 将物性计算温度范围的上限延伸到 40000 K.

等离子体条件下气体输运性质的计算一直是热等离子体物性研究的热点问题. Devoto 等^[5]提出一种简化方法将经典的 Chapman-Enskog 方法^[7,8]推广到热等离子体条件下. 这种方法认为在等离子体条件下, 由于电子质量比重粒子质量

* 国家自然科学基金 (批准号: 11072020, 50836007) 资助的课题.

[†] E-mail: whx@buaa.edu.cn

小得多, 电子与重粒子之间的碰撞对重粒子分布函数只有微小的影响, 因而可以忽略电子与重粒子之间的碰撞对重粒子组分分布函数的影响, 使电子的 Boltzmann 方程和重粒子的 Boltzmann 方程解耦, 电子和重粒子的输运系数就可以分别独立地计算出来. 近年来 Rat 等^[9,10] 认为电子和重粒子之间碰撞的耦合不能完全被忽略, 基于这种思想发展出一套改进的非简化输运性质计算方法, 然而根据 Colombo 等最新的研究表明^[11], 这种非简化输运性质计算方法获得的热导率、电导率与 Devoto 等的简化方法计算获得的结果差别很小, 但是双温度情形下的计算获得的扩散系数有一定差别.

本文采用 Devoto 发展的简化方法^[5] 进行了双温度氦等离子体的输运性质计算, 获得了在 300 K 到 40000 K 的温度范围内氦等离子体体系的黏性、热导率和电导率随压力和热力学非平衡参数 ($\theta = T_e/T_h$) 的变化情况, 并对等离子体输运性质的演化趋势进行了分析与讨论. 为了验证计算结果的准确性, 我们还将局域热力学平衡条件下氦等离子体输运性质的计算结果与文献报道的数据进行了对比, 结果符合良好.

2 氦等离子体组分与碰撞积分

2.1 氦等离子体组分计算

在本文的计算中, 假定氦等离子体由四种粒子组成, 即氦原子 (He), 一次电离离子 (He^+), 二次电离离子 (He^{++}) 和电子 (e) 组成. 等离子体组分随着温度变化可以由下述 Saha 方程^[12], 结合气体状态方程和电中性条件确定:

$$\frac{n_e n_{\text{He}^+}}{n_{\text{He}}} = 2 \exp\left(\frac{-\varepsilon_{i,\text{He}}}{k_B T_e}\right) \left(\frac{2\pi m_e k_B T_e}{h^2}\right)^{3/2} \times \left(\frac{Z_{\text{He}^+, \text{ex}}}{Z_{\text{He}, \text{ex}}}\right), \quad (1)$$

$$\frac{n_e n_{\text{He}^{++}}}{n_{\text{He}^+}} = 2 \exp\left(\frac{-\varepsilon_{i,\text{He}^+}}{k_B T_e}\right) \left(\frac{2\pi m_e k_B T_e}{h^2}\right)^{3/2} \times \left(\frac{Z_{\text{He}^{++}, \text{ex}}}{Z_{\text{He}^+, \text{ex}}}\right), \quad (2)$$

$$p = n_e k_B T_e + (n_{\text{He}} + n_{\text{He}^+} + n_{\text{He}^{++}}) k_B T_h, \quad (3)$$

$$n_e = n_{\text{He}^+} + 2n_{\text{He}^{++}}, \quad (4)$$

上式中, n_e , n_{He} , n_{He^+} , $n_{\text{He}^{++}}$ 分别代表电子、原子、一次电离和二次电离离子的数密度; k_B

是 Boltzmann 常数, m_e 为电子质量, h 为 Planck 常数; $\varepsilon_{i,\text{He}}$ 与 $\varepsilon_{i,\text{He}^+}$ 分别表示氦原子的一次和二次电离能; $Z_{\text{He}, \text{ex}}$, $Z_{\text{He}^+, \text{ex}}$ 和 $Z_{\text{He}^{++}, \text{ex}}$ 分别表示原子、一次电离离子和二次电离离子的配分函数. 值得指出的是, 文献 [13] 由于采用了不正确的 Saha 方程形式^[12], 因此导致计算获得的热力学非平衡情形下氦等离子体的组分, 以及热力学和输运性质都是有问题的.

图 1 给出了根据上述方法计算获得的局域热力学平衡条件下, 当气体压力分别为 0.1 atm, 1 atm 和 5 atm ($1 \text{ atm} = 1.01325 \times 10^5 \text{ Pa}$) 时, 氦等离子体组分摩尔浓度在 300 K 到 40000 K 的温度区间内的变化情况. 从图 1 中可以看出, 由于氦原子的一次电离能较高, 为 24.6 eV, 所以温度升高到 11000 K 以上, 气体才开始电离; 氦原子的二次电离能为 54.1 eV, 所以氦原子二次电离发生的温度也较高, 在 35000 K 左右. 从图 1 中还可以看出, 压力对等离子体组分的变化有一定的影响, 随着压力的升高, 一、二次电离反应的起始温度增加. 图 2 给出了压力为 1 atm 时, 热力学非平衡参数 θ 对氦等离子体体系中各组分摩尔浓度的影响. 从图中可以看出, 随着 θ 的增加, 电离反应起始温度向电子温度升高的方向移动.

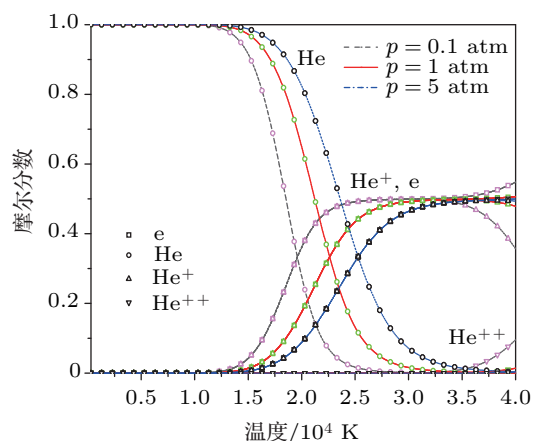


图 1 氦等离子体体系中组分随温度和压力的变化

图 3 给出了压力为 1 atm 时, 电子数密度在电子温度从 300 K 到 40000 K 区间内的变化规律. 从图中可以看出, 电子数密度自气体电离后开始增加, 在温度为 25000 K 左右达到峰值后略有下降. 其主要原因是气体一次电离结束后, 在压力不变的情况下, 根据气体状态方程, 温度增加会导致电子数密度下降. 从图 3 中还可以看出, 随着热力学非平衡

参数 θ 的增加, 电子数密度也随着增加, 这一趋势对于和电子有关的输运系数有着重要的影响.

获得不同温度和压力情形下的等离子体组分后, 由于气体的比焓、内能等均可表示为系统配分函数的函数, 而由定压条件下体系比焓对温度的偏导数可以计算得到气体的定压比热, 这样就可以确定氦等离子体体系的热力学性质.

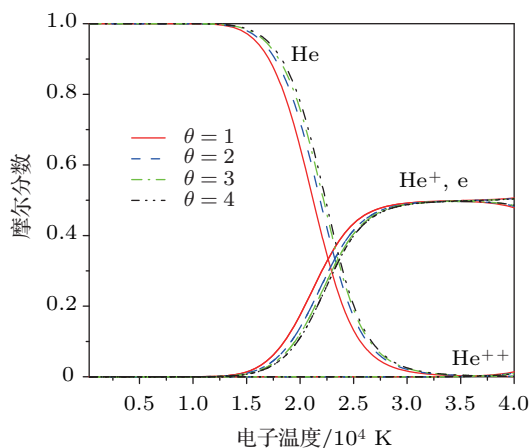


图2 热力学非平衡参数对氦等离子体组分的影响 ($P = 1 \text{ atm}$)

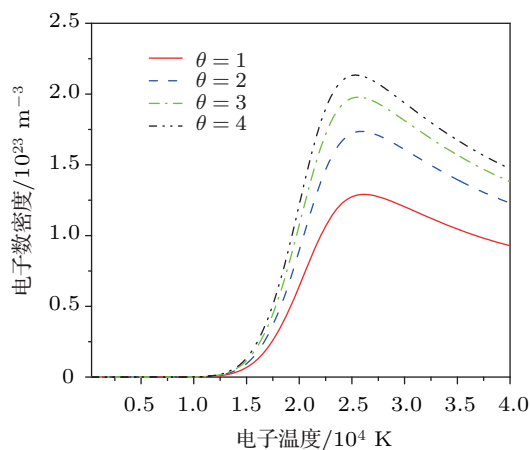


图3 热力学非平衡参数对电子数密度的影响 ($P = 1 \text{ atm}$)

2.2 碰撞积分

在进行输运性质的计算时, 需要用到由下式定义的各种粒子相互作用的碰撞积分^[5-8]

$$\Omega_{ij}^{(l,s)} = \sqrt{2\pi k_B T_{ij}^* / m_{ij}^*} \int_0^\infty \int_0^\infty \exp(-\gamma_{ij}^2) \gamma_{ij}^{2s+3} \times (1 - \cos^l \chi) b db \cdot d\gamma_{ij}, \quad (5)$$

式中, b 和 χ 分别是冲击参数和碰撞偏斜角度; γ_{ij} 是组分 i, j 相对速度 g_{ij} 的函数; T_{ij}^* 和 m_{ij}^* 分别为

碰撞粒子的有效温度和约化质量, 分别由下式给出:

$$m_{ij}^* = m_i m_j / (m_i + m_j), \quad (6)$$

$$T_{ij}^* = (m_i T_j + m_j T_i) / (m_i + m_j),$$

式中的 T_i 和 T_j 分别是组分 i, j 的温度.

氦原子 (He-He) 之间碰撞的相互作用势采用 Hulburt-Hirschfelder 势 (H-H 势)^[1,14]

$$\varphi(r) = \varphi_0 \left\{ \exp \left[-2\alpha_{HH} \left(\frac{r}{r_e} - 1 \right) \right] - 2 \exp \left[-\alpha_{HH} \left(\frac{r}{r_e} - 1 \right) \right] + \beta_{HH} \left(\frac{r}{r_e} - 1 \right)^3 \left[1 + \gamma_{HH} \left(\frac{r}{r_e} - 1 \right) \right] \times \exp \left[-2\alpha_{HH} \left(\frac{r}{r_e} - 1 \right) \right] \right\}, \quad (7)$$

上式中的参数 $\varphi_0 = 9.44 \times 10^{-4} \text{ eV}$, $r_e = 0.2968 \text{ nm}$, $\alpha_{HH} = 3.7740$, $\beta_{HH} = -85.0370$, $\gamma_{HH} = 0.2188$.

对于 He-He⁺ 之间的碰撞, 需要考虑电荷交换碰撞和弹性碰撞两种情况, 其中电荷交换碰撞截面由下式确定:

$$Q_{ex} = \frac{1}{2} (A - B \ln g)^2, \quad (8)$$

式中, g 是相对速度, 根据文献 [1] 的建议, 对于氦等离子体的情形, 常数 A 和 B 分别取为 1.842 nm 和 0.08214 nm . 对于弹性碰撞部分, 仍可用 H-H 势计算, 不过其中的各参数分别调整为 $\varphi_0 = 2.4730 \text{ eV}$, $r_e = 0.1081 \text{ nm}$, $\alpha_{HH} = 2.2300$, $\beta_{HH} = 0.2205$, $\gamma_{HH} = 4.3890$.

带电粒子之间的碰撞采用屏蔽库伦势计算:

$$\varphi(r) = \varphi_c (\lambda_D / r) \exp(-r / \lambda_D), \quad (9)$$

上式的 φ_c 由下式确定:

$$\varphi_c = Z_i Z_j e^2 / 4\pi\epsilon_0 \lambda_D. \quad (10)$$

(9), (10) 式中的 λ_D 为德拜半径, Z_i 和 Z_j 分别是组分 i, j 的电荷数, ϵ_0 是真空介电常数. 屏蔽库伦势的相应碰撞积分数值由文献 [15] 给出.

3 等离子体输运性质计算结果

等离子体输运性质的计算是建立在 Boltzmann 积分 - 微分方程求解的基础上, 应用 Chapman-Enskog 方法, 假设粒子的分布函数对 Maxwellian 分布是一阶扰动, 并用一系列 Sonine 多项式表示, 就可以得到一系列线性方程用来求得不同的输运

系数. 各种运输系数的计算方法和表达式可以参见文献 [9,10,16].

3.1 局域热力学平衡条件下的计算结果

图 4—6 分别给出了在 1 个大气压, 局域热力学平衡条件下, 即电子温度 T_e 等于重粒子温度 T_h 的情形下, 氦等离子体的黏性、热导率和电导率在 300 K 到 40000 K 之间随温度的变化情况. 为了验证计算结果的准确性, 我们将本文计算结果与文献 [1,5,6] 报道的数据进行了比较.

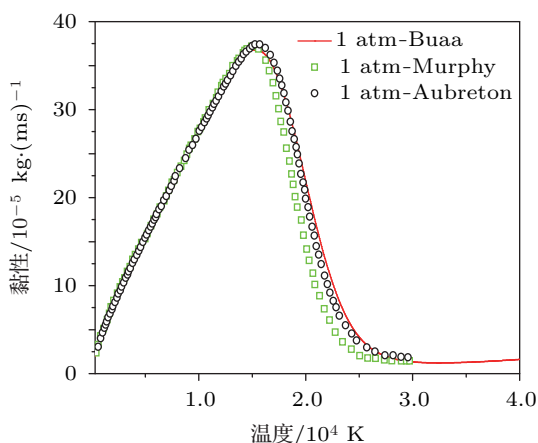


图 4 局域热力学平衡条件下氦等离子体的黏性

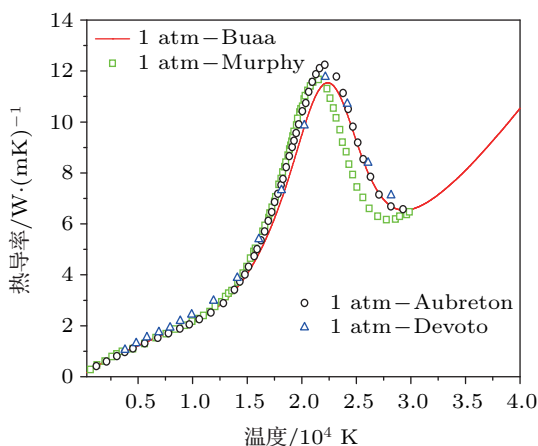


图 5 局域热力学平衡条件下氦等离子体的热导率

因为黏性主要是粒子质量的函数, 所以一般认为等离子体黏性主要是重粒子的贡献, 可以忽略电子对黏性系数的影响. 从图 4 可以看出, 在气体电离以前, 由于中性粒子之间的短程相互作用占据主导地位, 所以黏性随着气体的温度上升而增加. 气体电离后, 由于带电粒子之间的长程相互作用逐渐

占据主导地位, 导致气体的黏性逐渐下降.

等离子体的热导率由电子和重粒子的平动热导和反应热导组成. 在温度较低的区域, 重粒子的平动热导对气体热导率贡献最大; 在气体电离区间, 如图 5 中热导率的峰值区域正是对应氦气一次电离的区间, 反映了反应热导的贡献; 在高温区, 电子平动热导的贡献则占据主导地位.

等离子体的电导率主要来自于电子的贡献, 所以从图 6 可以看出, 电导率只有在气体开始电离后, 才随着温度的上升而增加.

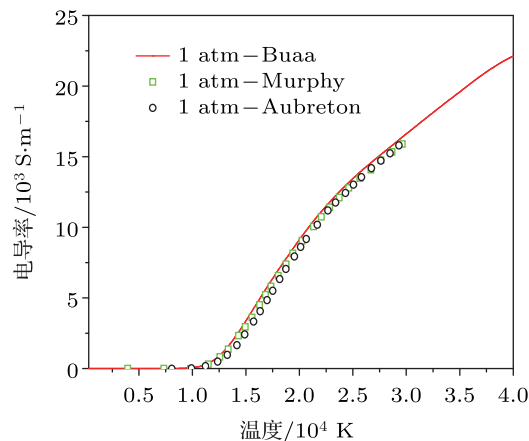


图 6 局域热力学平衡条件下氦等离子体的电导率

图 4、图 5 和图 6 给出了本文计算结果与 Aubreton^[1], Devoto^[5] 和 Murphy^[6] 的计算结果的比较. 从图 4 和图 5 可以看出, 本文计算获得氦等离子体的黏性与热导率在氦气开始电离前与文献报道结果符合较好, 在气体电离以后的温度区间内略有差别. 主要原因是不同研究者采用的计算碰撞积分的方法和数值略有不同. 在本文的计算中, 不同粒子之间的相互作用势和碰撞积分采用了最新文献 [14] 报道的结果.

3.2 热力学非平衡条件下的输运性质

图 7—9 分别给出压力为 0.01 atm, 1 atm 和 5 atm 时, 热力学非平衡参数 ($\theta = T_e/T_h$) 分别为 1, 2, 3, 4 时, 氦等离子体的黏性、热导率和电导率随温度的变化情况.

从图 7 可以看出, 压力对氦等离子体黏性有较大的影响, 其影响主要体现在两个方面: 一方面, 压力降低, 导致粒子数密度下降, 由于黏性主要来自于重粒子的贡献, 所以如图 7 所示, 气体黏性的峰值随着压力的降低而下降. 另一方面, 压力对氦等

离子体电离反应的温度区间有一定的影响,随着压力的降低,电离反应的温度区间向低温区移动,导致气体黏性的峰值亦随着向低温区移动.图7还表明,热力学非平衡参数 θ 对气体的黏性也有一定的影响,随着 θ 的增加,电子温度不变的前提下,重粒子温度下降,所以在图中给出的气体黏性的峰值随着 θ 的增加向电子温度升高的方向移动.

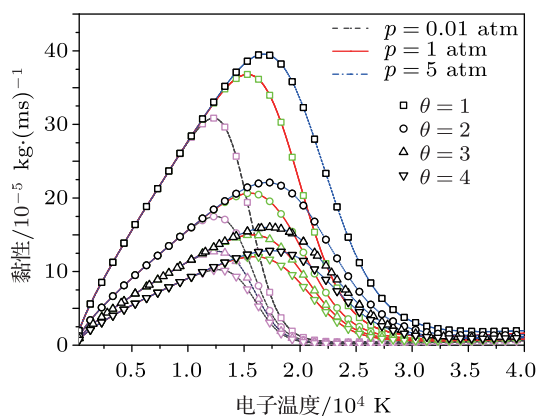


图7 热力学非平衡条件下氢等离子体的黏性

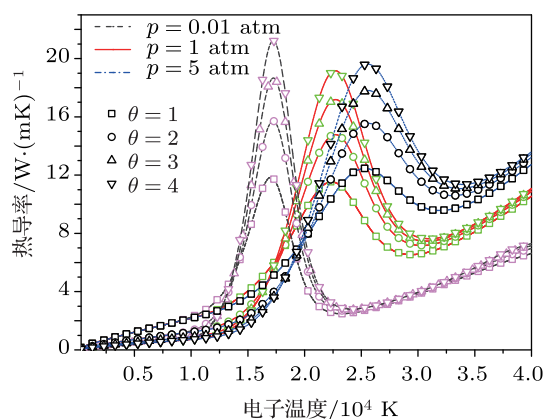


图8 热力学非平衡条件下氢等离子体的热导率

如前文所述,等离子体的热导率由重粒子和电子的平动热导和反应热导所组成,曲线的峰值主要对应气体的电离区域.从图8给出的热导率变化趋势来看,压力对热导率也有较大的影响.由于随着压力的降低,电离反应的温度区间向低温移动,所以对应的热导率的峰值也随之向低温区移动.从图8中还可以看出,热力学非平衡参数 θ 对热导率也有明显的影响,尤其是在电离反应区间所对应的热导率峰值附近.其原因可以结合前面给出的电子数密度随热力学非平衡参数 θ 的变化趋势来解释,由于电子数密度随着 θ 的增加而增加,表明在 θ 较

大时,电离复合反应释放出来的能量更多,从而导致在 θ 较大时,热导率的峰值升高.

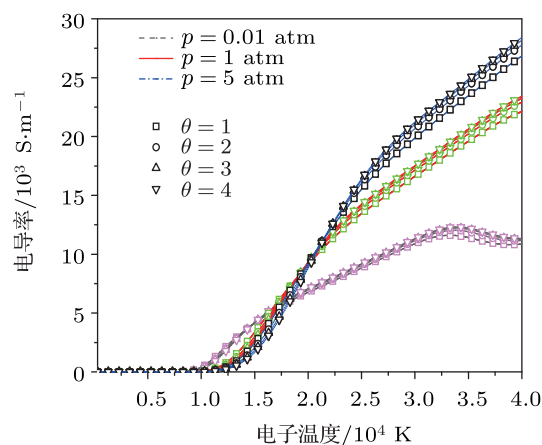


图9 热力学非平衡条件下氢等离子体的电导率

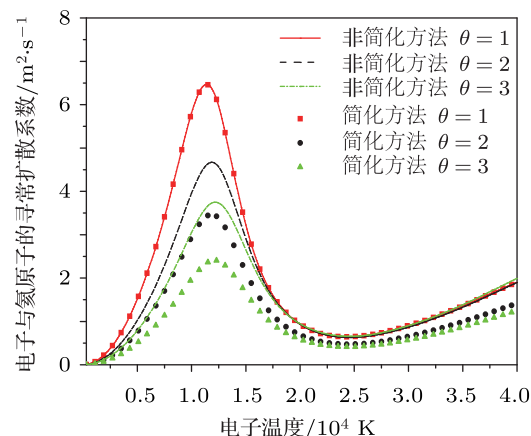


图10 电子与氢原子寻常扩散系数随电子温度的变化

图9给出了在不同压力和热力学非平衡参数 θ 下,氢等离子体电导率随温度的变化情况.由于电导率主要是电子的贡献,所以电导率随着电子数密度的增加而增加.压力对电导率的影响也体现在两个方面,一方面压力降低,使一次电离反应发生的温度区间向低温区移动,所以从图9中可以看出,在电子温度为10 000 K到17 000 K的区间内,压力为0.01 atm时等离子体电导率高于压力为1 atm和5 atm时所对应的电导率.另一方面,压力降低会导致电子数密度下降,所以从图9中可以看出,在电子温度高于17 000 K时,由于低压情形对应的电子数密度较小,所以相应地压力为0.01 atm情形的电导率低于1 atm和5 atm下的电导率数值.另外,图中还值得注意的是,在压力为0.01 atm时,当电子温度在高于34000 K时,电导率数值略有下降,

原因是在氦的二次电离结束后, 出现的 He^{++} 导致电子与二价离子之间的库伦碰撞积分增加, 远大于一价离子与电子的碰撞积分, 使计算获得的电导率有所下降. 文献 [10, 16] 报道的氮氧等离子体电导率和氩等离子体的电导率随温度的变化趋势中也出现了类似现象.

本文还分别采用 Devoto 的简化方法 [5] 和 Rat 等 [9,10] 提出的非简化方法计算电子与原子的寻常扩散系数, 计算结果表明, 在热力学非平衡条件下, 两种方法计算得到的扩散系数略有差别. 图 10 给出了在 1 atm 时, 两种计算方法获得电子与原子寻常扩散系数的比较. 从图中可以看出在 $\theta = 1$ 时, 即热力学平衡条件下, 二种方法计算获得的结果相同, 但是在 θ 不等于 1 时, 即热力学非平衡条件下, 采用非简化方法获得扩散系数值略高于简化方法获得的计算结果, 表明采用电子和重粒子解耦的简化方法计算扩散系数可能会低估扩散系数的数值.

与工业上常用的氩等离子体相比, 氦等离子体具有较高的黏性和热导率. 上述计算结果表明, 随着压力的降低和热力学非平衡程度的增加, 氦等离

子体的黏性会下降, 热导率的峰值的大小和位置也会产生变化. 深入了解氦等离子体的这些特性可以为其在工业和航天航空方面的应用提供参考.

4 结 论

本论文通过计算获得了在较宽温度和压力范围内的双温度氦等离子体体系的热力学组分及输运性质. 在热力学平衡条件下获得的氦等离子体输运性质与先前文献报道的结果符合较好, 验证了本文采用方法的可行性.

研究结果表明, 压力降低使氦的电离反应向温度降低的方向移动, 而热力学非平衡参数 θ 的增加会推动电离反应向电子温度升高的方向移动. 这种变化趋势, 对于输运性质有着重要的影响, 使氦等离子体的黏性、热导率的最大值和峰值区域产生变化. 由于电导率的主要贡献来自于电子, 所以电子数密度随压力和 θ 的变化对氦等离子体电导率有着直接的影响.

-
- [1] Aubreton J, Elchinger M F, Rat V, Fauchais P 2004 *Journal of Physics D: Applied Physics* **37** 34
 - [2] Aubreton J, Elchinger M F, Fauchais P, Rat V, Andre P 2004 *Journal of Physics D: Applied Physics* **37** 2232
 - [3] Walker Q E, Cappelli M A 1999 30th AIAA Plasmadynamics and Lasers Conference. Norfolk, VA: AIAA, 1999 p1-6
 - [4] Jonkers J, Sande M, Sola A, Gamero A, Mullen J 2003 *Plasma Sources Science and Technology* **12** 30
 - [5] Devoto R S, Li C P 1967 *Journal of Plasma Physics* **2** 17
 - [6] Murphy A B. 1997 *IEEE Transactions on Plasma Science* **25** 809
 - [7] Hirschfelder J O, Curtiss C F, Bird R B 1964 *Molecular theory of gases and liquids* (New York: John Wiley and Sons, Inc)
 - [8] Chapman S, Cowling T G 1970 *The mathematical theory of non-uniform gases: an account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases* (Cambridge: Cambridge University Press)
 - [9] Rat V, Andre P, Aubreton J, Elchinger M F, Fauchais P, Lefort A 2001 *Phys. Rev. E* **64** 026409
 - [10] Rat V, Andre P, Aubreton J, Elchinger M F, Fauchis P, Vacher D 2002 *Journal of Physics D: Applied Physics* **35** 981
 - [11] Colombo V, Ghedini E, Sanibondi P 2011 *Plasma Sources Science & Technology* **20** 035003
 - [12] Han P, Chen X, Li H P 1999 *Chinese Physics Letters* **16** 193
 - [13] Kannappan D B, Bose T K 1980 *Physics of Fluids* **23** 1473
 - [14] Bruno D, Catalfamo C, Capitelli M, Colonna G, De Pascale O, Diomede P, Gorse C, Laricchiuta A, Longo S, Giordano D, Pirani F 2010 *Physics of Plasmas* **17** 112315
 - [15] Liboff R L 1959 *Physics of Fluids* **2** 40
 - [16] Ghorui S, Heberlein J V R, Pfender E 2007 *Plasma Chemistry and Plasma Processing* **27** 267

Calculation of two-temperature transport coefficients of helium plasma*

Wang Hai-Xing[†] Sun Su-Rong Chen Shi-Qiang

(School of Astronautics, Beihang University, Beijing 100191, China)

(Received 14 November 2011; revised manuscript received 20 February 2012)

Abstract

The knowledge of two-temperature transport coefficients over wide temperature and pressure range is essential to model the flow and heat transfer in plasma process. In this study, the plasma composition is calculated using the Saha equation and the transport coefficients are worked out using Chapman-Enskog method expanded up to higher approximation. The electron temperature T_e is assumed to be different from that of heavy species T_h . The evolutions of viscosity, thermal conductivity, and electric conductivity of helium plasma are presented in electron temperature range from 300 K to 40 000 K. It is shown that the transport coefficients strongly depend on pressure and non-equilibrium parameter ($\theta = T_e/T_h$). These values in local thermodynamic equilibrium state accord well with previously reported data.

Keywords: helium plasma, transport properties, thermodynamic non-equilibrium

PACS: 52.25.Fi, 51.10.+y, 51.20.+d

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11072020, 50836007).

[†] E-mail: whx@buaa.edu.cn