

氙等离子体输运性质计算*

陈艳秋†

(中国民航科学技术研究院, 航空安全技术实验室, 北京 100028)

(2014年4月9日收到; 2014年6月7日收到修改稿)

采用基于将Chapman-Enskog方法扩展到高阶近似的方法计算获得了温度范围在300—40000 K, 不同压力条件下氙等离子体的黏性、热导率和电导率. 热力学平衡条件下的计算结果与文献报道的实验和计算结果符合良好, 验证了计算方法和结果的合理性与准确性. 在此基础上, 计算获得了电子温度(T_e)不等于重粒子温度(T_h)的热力学非平衡和化学平衡条件下氙等离子体的输运性质, 并分析了输运性质随压力和热力学非平衡程度变化的原因.

关键词: 氙等离子体, 输运性质, 双温度**PACS:** 52.25.Fi, 51.10.+y, 51.20.+d**DOI:** 10.7498/aps.63.205201

1 引言

等离子体形态的氙具有许多独特的优点, 因而应用十分广泛. 例如氙等离子体具有几乎连续的光谱和极高的发光强度, 可以在高压电弧放电作用下产生类似日光的明亮白光, 因此可以在照明技术上用来充填光电管、闪光灯和氙气高压灯^[1,2]. 与其他惰性气体相比, 氙电离后具有较大的离子质量, 所以在航天领域常被用于离子和霍尔发动机的工作气体^[3,4]. 另外, 氙还可用于激光器、焊接与切割难熔金属, 在原子核反应堆和高能物理方面也有很多用途^[5-10]. 在上述应用中, 获得各种条件下的输运性质对于理解氙等离子体在上述装置中的流动、传热以及各种物理过程是十分必要的. 虽然在低温条件下可以采用实验方法测量这些性质, 但是由于各种条件的限制, 部分电离状态的气体性质的准确测量具有相当大的困难, 且实验数据覆盖的温度范围十分有限. 因此, 至今为止, 人们通常在实验与理论计算结果相对照的基础上, 采用将Chapman-Enskog方法推广到高阶的方法获得等离子体条件下的输运性质^[11-14].

氙原子核外层有54个电子, 其原子结构相对于其他常用惰性气体氦和氩较为复杂, 一次电离能也较低. 随着气体温度的升高, 在万度量级的温度区间内, 会相继出现三次电离, 导致氙等离子体的热力学和输运性质计算较为困难. 迄今为止, 虽有一些关于氙气性质的报道, 但大都只限于氙未电离的低温区间^[15-20]. 随着等离子体形态氙的广泛应用, 氙等离子体物性的研究进一步吸引了学者们的关注. 文献^[21]首次给出了热力学平衡条件下、温度范围为2000—25000 K之间氙等离子体的输运性质. 然而, 从上面给出的各种实际应用来看, 一方面氙等离子体工作的温度上限可能会超过25000 K; 另一方面相当一部分氙等离子体在装置中是处于热力学非平衡(即电子温度不等于重粒子温度)状态. 因此, 在本文的研究中, 我们拓展了等离子体输运性质覆盖的温度区间, 并着重考察了热力学非平衡状况对氙等离子体输运性质的影响.

本文采用文献^[22-26]发展的、将Chapman-Enskog方法推广到三阶的方法进行了热力学平衡和非平衡条件下的氙等离子体性质的计算, 获得了在300—40000 K温度范围内氙等离子体黏性、热导率和电导率随压力和热力学非平衡程度的变化情

* 国家自然科学基金(批准号: 11275021, 11072020)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: chenyy@mail.castc.org.cn

况. 为了验证计算结果的准确性, 我们还将计算结果与文献报道的各种氙等离子体相关性性质进行了比较, 结果符合良好.

2 计算方法

计算输运性质的第一步是确定等离子体体系的组成. 在本文中氙等离子体体系的组成是通过求解化学平衡条件下的 Saha 方程获得, 方程的具体形式在文献 [27] 中给出. 本文计算中考虑的组分有 Xe, Xe^+ , Xe^{++} , Xe^{+++} 和电子. 氙原子的一次、二次和三次电离能分别为 12.13, 20.97, 31.05 eV. 计算所需的配分函数根据 Moore [28] 和美国国家标准与技术研究所 [29] 提供的能级和简并度数据计算得到.

输运性质的计算需要用到各种组分相互作用的碰撞积分, 而碰撞积分是基于 Maxwell 分布的两种组分之间的平均碰撞截面. 组分 i 和 j 之间相互作用的碰撞积分由下式定义

$$\Omega_{ij}^{(l,s)} = \left(\frac{kT}{2\pi\mu_{ij}} \right) \int_0^\infty \exp(-\gamma^2) \gamma^{2s+3} Q_{ij}^{(l)} d\gamma, \quad (1)$$

式中约化能为 $\gamma = \mu_{ij}g^2/(2kT)$, μ_{ij} 为组分 i 与 j 的约化质量, g 是组分碰撞的相对速度, k 为 Boltzmann 常数, T 为温度, l 是碰撞积分的类型, s 表示碰撞积分的阶数. $Q_{ij}^{(l)}$ 是组分之间的气动碰撞截面, 由下式给出

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

(2) 式中 b 是碰撞参数, χ 为碰撞偏斜角度. 碰撞偏斜角度是碰撞参数 b 、组分相对速度 g 和粒子相互作用势 $V(r)$ 的函数, 此处 r 为相互作用粒子的距离.

在等离子体体系中不同组分之间的碰撞积分通常由三种方式获得: 1) 一些碰撞积分在先前的文献中以表格的形式给出, 可以直接使用; 2) 部分相互作用, 例如电子和中性粒子的碰撞积分是通过 (1) 式将实验测量获得的动量交换截面积分获得; 3) 在大多数情形下, 我们只能根据文献中发表的粒子之间的相互作用势 $V(r)$, 采用 (1) 和 (2) 式直接积分获得.

在本文中氙原子与氙原子 (Xe-Xe) 之间碰撞的相互作用势采用 Lennard-Jones 势 [30] 计算, 其表达式为

$$\varphi(r) = 4\epsilon[(r^*)^{-12} - (r^*)^{-6}], \quad (3)$$

式中 $r^* = r/\sigma$, r 是原子间距离, σ 为相互作用势为 0 时原子之间的距离, ϵ 是势阱的深度. 对于氙原子来说, 选取 $\sigma = 4.055 \text{ \AA}$, $\epsilon/k = 229.0$ [31].

如上所述, 电子与原子的动量交换截面是根据 Frost 和 Phelps [32] 的实验数据得到的. 然后电子与原子的碰撞截面可以根据动量交换截面进行积分得到 [13]

$$Q^{(1,s)} = \frac{2(l+1)(k_B T_e)^{-(s+2)}}{(s+1)! [2l+1 - (-1)^l]} \times \int_0^\infty \exp^{-E/(k_B T_e)} Q^{(1)} E^{(s+1)} dE, \quad (4)$$

式中 E 为电子的能量.

对于 Xe-Xe⁺ 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 [31]

$$Q_{\text{ex}} = \frac{1}{2}(A - B \ln g)^2, \quad (5)$$

(5) 式中, A 和 B 的数值由实验得到, 对于氙, $A = 27.24$, $B = 1.26$. 然后碰撞截面 $Q^{(1,s)}$ 可以采用文献 [31] 给出的拟合关系获得:

$$\begin{aligned} Q^{(1,s)} = & (96B^2 - 19.62AB + A^2) \\ & + (9.8B^2 + B^2\beta/2 - AB) \ln(T_h/m_h) \\ & + B^2[\ln(T_h/m_h)]^2/4 \\ & + B^2(\beta^2 + 37.2\beta + 1.644 - \eta) \\ & - AB\beta, \end{aligned} \quad (6)$$

式中 T_h 和 m_h 分别为体系中重粒子的温度和质量, β 可以用下式表示:

$$\beta = \left(\sum_1^{s+1} 1/n \right) - \gamma, \quad \eta = \sum_1^{s+1} 1/n^2, \\ \gamma = 0.577215665.$$

对于氙原子和离子之间的弹性碰撞, 作用势仍然采用与原子-原子碰撞相同的 Lennard-Jones 势.

带电粒子 (电子与电子, 电子与离子及离子与离子) 之间的碰撞采用屏蔽库仑势 [22,33] 计算

$$\varphi(r) = (Z_i Z_j e^2/r) \exp(-r/\lambda_D), \quad (7)$$

式中 λ_D 由下式确定

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k_B T_e}{e^2 n_e}}, \quad (8)$$

(7), (8) 式中的 λ_D 为德拜半径, ϵ_0 是真空介电常数. 带电粒子之间的碰撞积分可以根据 Mason 给出的数据表 [33] 插值求得.

由上面给出的各种粒子之间的碰撞积分可以计算等离子体的各种输运性质, 如黏性、导热系数、电导率等. 详细的计算方法和公式参见文献[26,27,34,35].

3 氙等离子体输运性质计算结果

3.1 局域热力学平衡条件下的计算结果

图1给出了低温区域氙气黏性随温度的变化情况. 由于在计算的温度范围内气体没有电离, 所以气体的黏性主要取决于氙原子之间的相互作用. 从图中可以看出, 本文计算结果与文献报道结果符合较好, 说明本文采用的原子之间的相互作用势是比较合理的. 图2给出了较宽温度范围内计算获得氙等离子体黏性随温度的变化情况, 图中连线部分是本文的计算结果, 符号部分是Devoto的计算结果[21]. 从图中可以看出, 在10000 K以下, 本文的结果与Devoto的计算结果符合良好, 但是在高温区存在一定的分歧, 主要原因是在Devoto的计算中没有考虑氙离子的电离[21]. 二次电离过程的产生会增加带电粒子之间的碰撞截面, 而黏性数值与碰撞截面成反比, 因而碰撞截面的增加会引起黏性降低. 从图中也可以看出压力对黏性的影响, 随着压力的增加, 气体电离的起始温度增加, 导致气体黏性的峰值也向高温区移动.

图3给出了低温区域氙气的热导率. 同样, 在温度2000 K以下的区域, 气体没有电离, 所以原子之间的相互作用对热导率的贡献占据主导. 从图中可以看出, 本文计算的结果与Saxena实验测量的结果[19]以及文献[20, 36]给出的计算结果符合较好. 原子和原子之间的相互作用除了采用Lennard-Jones势外, 有的学者还采用如下所示的六阶指数势:

$$\varphi(r) = \frac{\varepsilon}{1 - 6\alpha} \left[\frac{6}{\alpha} e^{\alpha(1-r/\sigma)} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]. \quad (9)$$

而在计算热导率时, 本文采用的重粒子的相互作用势是Lennard-Jones势, 通过与图3给出的采用六阶指数势计算获得的热导率的比较表明: 在低温区, 采用六阶指数势或Lennard-Jones势对热导率的影响较小.

图4给出了热力学平衡条件下氙等离子体的热导率. 如图所示, 在温度低于二次电离反应发生所对应的温度区间内, 本文计算获得的热导率与

Devoto[21]的计算结果符合较好; 在高温条件下略低于Devoto结果的原因是本文计算中考虑二次电离后, 高价带电粒子之间碰撞截面增大, 由于热导率和黏性相似都是与碰撞截面成反比, 所以碰撞截面的增加也会导致热导率降低. 从图中还可以看出压力对热导率的影响, 随着压力的升高, 等离子体体系热导率变大.

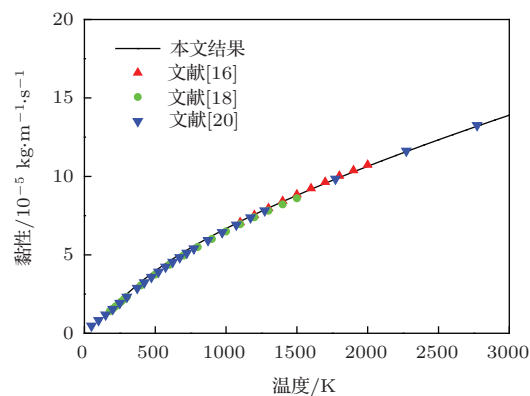


图1 低温区域氙气的黏性

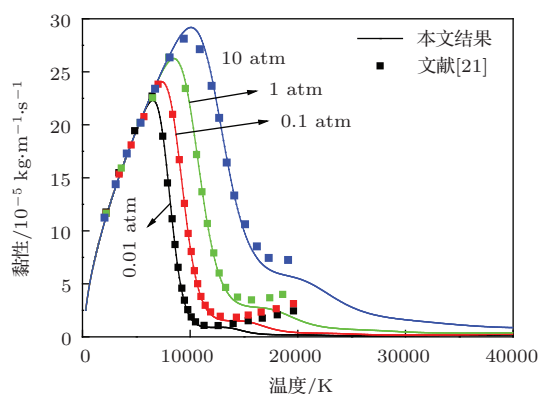


图2 热力学平衡条件下氙等离子体黏性

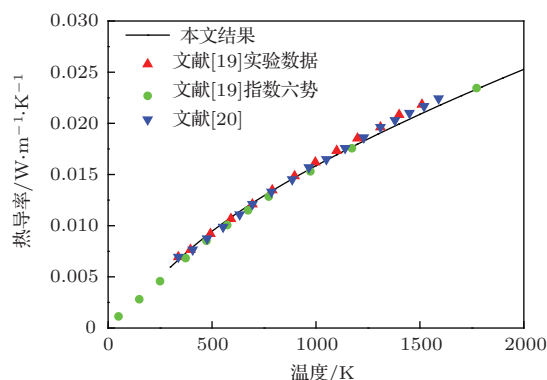


图3 低温区氙气的热导率

图5给出了热力学平衡条件下氙等离子体的电导率与Devoto[21]计算结果的比较. 由于电导率主要是来自电子的贡献, 所以电导率随着电子数密

度的增加而增加. 从图中可以看出, 本文计算结果在低温区, 即二次电离出现之前与Devoto的计算结果符合较好, 但当二次电离反应发生后, 电导率的数值有所降低, 而Devoto的计算结果一直增加, 并没有出现由于二次电离产生离子而引起电导率降低^[26], 这也是由于在Devoto^[21]的计算过程中没有考虑生成二价离子的反应, 因而不能准确给出氙等离子体在高温区的电导率.

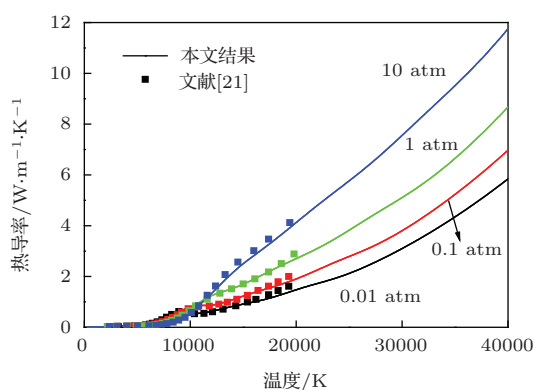


图4 热力学平衡条件下氙等离子体热导率

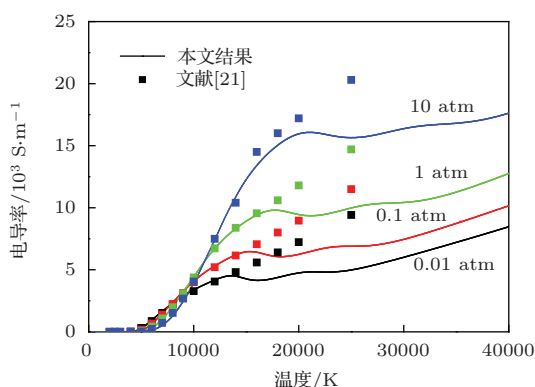


图5 氙等离子体的电导率与文献比较图

3.2 双温度条件下的计算结果

在等离子体形态氙的各种应用中, 体系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, 即双温度等离子体. 因此在对类似物理过程进行分析和数值模拟时, 需要掌握和了解热力学非平衡条件下氙等离子体的各种性质. 通常采用电子温度与重粒子温度之比 $\theta = T_e/T_h$ 作为表征等离子体体系热力学非平衡程度的主要参数.

图6给出了双温度条件下氙等离子体黏性的计算结果. 从图中可以看出, 压力和热力学非平衡程度对气体的黏性有较为明显的影响. 随着压力 P 的增加, 体系中粒子的数密度增加, 所以黏性的峰值大于低压情形. 如前所述, 在低温下, 由于黏

性主要来自于原子的贡献, 在相同的电子温度条件下, θ 值较大对应的原子温度较低; 而在较低原子温度情形下由Lennard-Jones势计算获得的碰撞截面较大, 因而随着 θ 值的增加, 氙等离子体的黏性下降. 随着温度的继续升高, 一旦气体开始电离, 气体中的长程库仑作用力占据主导, 导致组分之间碰撞截面大幅增加, 就会导致气体黏性迅速下降.

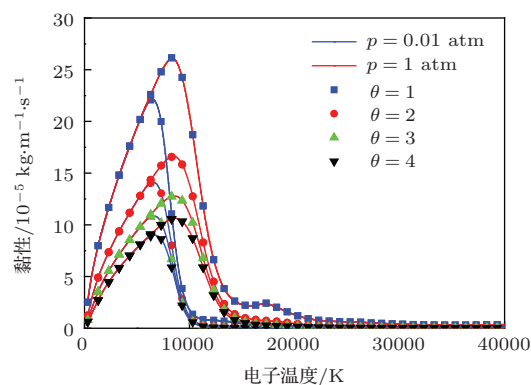


图6 (网刊彩色) 双温度条件下氙等离子体的黏性

图7给出了双温度条件下氙等离子体热导率的计算结果. 从图中可以看出, 在低温区域, 低压条件下计算获得的热导率较高, 而在10000 K以上的温度区间, 1.0 atm条件下的热导率高于0.01 atm的情形. 主要原因是热导率的第一个峰值主要是反应热导的贡献, 而反应热导是由于电离反应引起的, 随着压力的降低, 电离反应的温度区间向低温移动^[26], 所以对应的热导率的峰值也随之向低温区移动. 在高温区内, 平动热导率起主导作用, 所以数密度较高的、高压情形的热导率要高于低等子体体系压力的热导率. 从图中还可以看出, 在低气压情形下, 热力学非平衡参数对热导率的影响不大, 而在较高气体压力的情形下, 热力学非平衡参数对热导率的影响变得比较明显. 在低温区, 即气体未发生电离以前, 热导率随着 θ 值的增加而减小, 这主要是由于在低温区原子的平动热导率占据主要作用, 而且原子之间的碰撞截面随着温度的减小而增加, 因而热导率会随着 θ 值的增加而减小; 在高温区, 电子的平动热导率起主导作用, 电子的平动热导率主要与电子的数密度、电子相关的碰撞截面有关, 由于电子的数密度随着 θ 值的增加而增大, 因而热导率随着 θ 值的增加而增加.

由于气体电离以后才能导电, 所以氙等离子体的电导率主要取决于电子数密度和电子相关的输运过程. 如图8所示, 1.0 atm条件下的电导率高于

0.01 atm 情形的电导率, 其主要原因就是体系中含有较高的电子数密度. 而 θ 值增加时, 体系中的电子数密度增加, 因而使体系的电导率高于低 θ 值对应的情形.

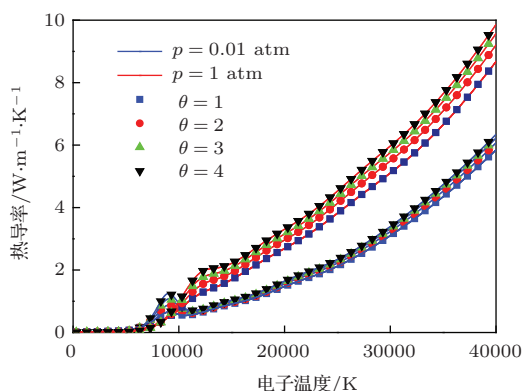


图7 (网刊彩色) 双温度条件下氩等离子体的热导率

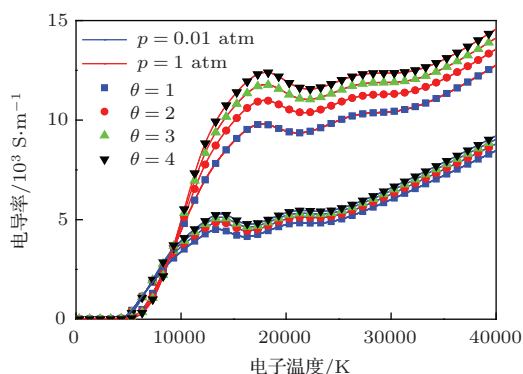


图8 (网刊彩色) 双温度条件下氩等离子体的电导率

4 结 论

本文采用将Chapman-Enskog方法推广到三阶的方法进行了热力学平衡和非平衡条件下氩等离子体性质的计算, 考虑到实际应用可能遇到的情况, 计算的电子温度范围从300 K一直延伸到40000 K, 并考虑了气体压力以及热力学非平衡程度对氩等离子体黏性、热导率和电导率的影响. 为了验证计算结果的准确性, 我们将计算结果先与文献报道的低温区未电离状态氩的输运性质进行比较, 然后将热力学平衡条件下氩等离子体性质的计算结果与Devoto的计算结果进行了比较, 验证了我们所采用的碰撞积分和计算方法的合理性与准确性. 研究表明, 等离子体体系组分、压力和热力学非平衡参数 θ 都会对输运性质产生一定的影响. 其中等离子体体系组分的影响最为关键, 体系压力和热力学非平衡参数 θ 对气体性质的影响一定

程度上也是通过组分的变化而体现, 而组分的变化往往会引起主导气体输运性质的碰撞截面的变化, 进而直接影响气体性质.

参考文献

- [1] William T, Anderson J R 1951 *J. Opt. Soc. Am.* **41** 385
- [2] Martinez A, Roberts G, Garzarella K, Lutz M, Caswell M 2013 *Photodermatol. Photo.* **29** 78
- [3] Beattie J R, Matossian J N, Robson R 1990 *J. Propul. Power* **6** 145
- [4] Linnell J A, Gallimore A D 2006 *J. Propul. Power* **22** 1402
- [5] Helmick H H, Fuller J L, Schneider R T 1975 *Appl. Phys. Lett.* **26** 327
- [6] Frolov V A, Mamaev V S, Bronin N S, Volkov P G 1994 *Weld. Int.* **8** 41
- [7] Kaneoka I 1998 *Science* **280** 851
- [8] Ault E R, Braford J R, Bhaumik M L 1975 *Appl. Phys. Lett.* **27** 413
- [9] Wang L, Chen D Y, Xia Y Q, Fan R W, He W M 2012 *Chin. Phys. B* **21** 014206
- [10] Zhang D H, Shi Y L, Jiang J, Dong C Z, Fumihiro K 2012 *Chin. Phys. B* **21** 013402
- [11] Hirschfelder J O, Curtiss C F, Bird R B 1964 *Molecular Theory of Gases and Liquids* (New York: John Wiley and Sons, Inc)
- [12] 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)
- [13] Devoto R S 1966 *Phys. Fluids* **9** 1230
- [14] Murphy A B 2000 *Plasma Chem. Plasma Process.* **20** 279
- [15] Maitland G C, Smith E B 1972 *J. Chem. Eng. Data.* **17** 150
- [16] Goldblatt M, Wageman W 1971 *Phys. Fluids* **14** 1024
- [17] Clarke A, Smith E 1968 *J. Chem. Phys.* **48** 3988
- [18] Dawe R, Smith E 1970 *J. Chem. Phys.* **52** 693
- [19] Saxena V K, Saxena S C 1969 *J. Chem. Phys.* **51** 3361
- [20] Kestin J, Knierim K, Mason E A, Najafi B 1984 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **13** 229
- [21] Devoto R S 1969 *AIAA J.* **7** 199
- [22] Devoto R S 1967 *Phys. Fluids* **10** 354
- [23] Devoto R S 1967 *Phys. Fluids* **10** 2105
- [24] Devoto R S 1968 *J. Plasma Phys.* **2** 617
- [25] Murphy A B 1997 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **25** 809
- [26] Wang H X, Sun S R, Chen S Q 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 195203 (in Chinese) [王海兴, 孙素蓉, 陈士强 2012 物理学报 **61** 195203]
- [27] Murphy A B, Arundell C J 1994 *Plasma Chem. Plasma Process.* **14** 451
- [28] Moore C E 1949 *Atomic Energy Levels National Bureau of Standards Circular No. 467*. US Government Printing Office, Washington DC

- [29] Ralchenko Y, Kramida A, Reader J 2010 *Team 2008 NIST Atomic Spectra Database* (Version 3.1.5) National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD
- [30] Vicharelli P 1987 *J. Appl. Phys.* **62** 2250
- [31] Bose T K 1988 *Prog. Aerospace Sci.* **25** 1
- [32] Frost L S, Phelps A V 1964 *Phys. Rev.* **136** 1538
- [33] Mason E A, Munn R J, Smith F J 1967 *Phys. Fluids* **10** 1827
- [34] Devoto R S 1965 *Ph. D. Dissertation* (Ann Arbor, Michigan: Stanford University)
- [35] Wang H X, Chen S Q, Chen X 2012 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **45** 165202
- [36] Mason E A, Rice W E 1954 *J. Chem. Phys.* **22** 843

Calculation of transport coefficients of a xenon plasma*

Chen Yan-Qiu[†]

(China Academy of Civil Aviation Science and Technology, Beijing 100028, China)

(Received 9 April 2014; revised manuscript received 7 June 2014)

Abstract

The viscosities, thermal conductivities and electrical conductivities of xenon plasma are obtained using Chapman-Enskog method expanded up to a higher approximation in a computation range from 300 to 40000 K under different pressures. In the local thermodynamic equilibrium regime, the results are compared with published experimental and computational results, showing that they are in good agreement with each other, which validates the accuracy of the computational method. The transport properties of xenon plasma are further obtained under the chemical equilibrium and thermal nonequilibrium, in which the electron temperature T_e is different from that of heavy species T_h . The evolutions of the transport properties with pressure and thermal nonequilibrium parameters ($\theta = T_e/T_h$) are presented and analyzed.

Keywords: xenon plasma, transport properties, two-temperature

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

DOI: 10.7498/aps.63.205201

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11275021, 11072020).

† Corresponding author. E-mail: chenyq@mail.castc.org.cn