

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ И ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ПЛАЗМЫ ЭЛЕМЕНТОВ ПОЛИМЕРНОГО РЯДА (H, C, N, O, F, Si)

Ю.С.Протасов, Ю.Ю.Протасов, В.Д.Телех

*Московский государственный технический университет им. Н.Э.Баумана УНЦ фотонной
энергетики*

107005, г. Москва, 2-я Бауманская ул., д.5. protasov@power.bmstu.ru

Термодинамические характеристики и транспортные свойства плазмообразующих элементов полимерного ряда (C, N, O, F, Si, H) представляют помимо общезначимого – значительный практический интерес при осуществлении широкого спектра плазмохимических устройств и комплексов (плазменного синтеза и модификации поверхности, высокотемпературного формообразования полимеров), использующих их как активные среды.

Целью описываемого цикла исследований и разработок является создание автоматизированной системы научных и инженерных расчетов (АСНИР) термодинамических, оптических и транспортных свойств газо-плазменных активных сред различного химического и ионизационного состава, плазмообразующих элементов конструкционных материалов энергетических установок в широком диапазоне параметров (температур $T \sim 5 \cdot 10^3 - 5 \cdot 10^6$ К, плотностей $\rho \sim 10^{-4} - 10^2$ кг/м³ и энергии квантов $h\nu \sim 10^{-1} - 10^4$ эВ); представленное ниже описание ее этапа – содержит примеры программной реализации комплекса и генерации соответствующих баз и банков данных по термодинамическим и транспортным свойствам плазмы элементов полимерного ряда (C, H, F, N, O, Si).

Разработанная АСНИР ТОТ МГТУ представляет собой единый комплекс системных и прикладных подпрограмм, баз и банков данных, управляющей информационной системы и интерфейсных подпрограмм. При создании АСНИР для определения свойств высокотемпературных активных сред сложного химического состава разработаны: 1) программные компоненты АСНИР для расчета переносных и термодинамических характеристик атомарной многокомпонентной плазмы в широком диапазоне изменения основных параметров (температуры, давления). Физико-математический формализм, используемый в расчетных подпрограммах подробно описан в [1-4]; 2) созданы базы данных входной информации – по квантово-механическим состояниям, сечениям элементарных процессов атомов и ионов; 3) генерируются банки данных по термодинамическим (ионизационный состав, давление, внутренняя энергия, энтальпия, энтропия, изобарные и изохорные теплоемкости, эффективный показатель адиабаты, скорость звука) и переносным (коэффициенты электро- и теплопроводности, диффузии, вязкости, термо-э.д.с.) свойствам элементов полимерного ряда.

В качестве входных данных для АСНИР ТОТ МГТУ используются: плотность, температура (или другие два независимых термодинамических параметра), элементный состав плазмы, а также энергетические уровни всех атомов и ионов, входящих в смесь. Выходными данными являются зависимости термодинамических функций, ионизационного состава, переносных свойств для диапазона входных данных, представляемые в удобном для анализа виде (рис. 1 – 3).

Входные БД созданы из обобщенного массива теоретических и экспериментальных исследований и представляют соответствующим образом сформатированные данные в виде файлов для каждого элемента от водорода до фтора, а также Ar, Mg, Ti, Cr, Mn, Fe, Ni, Cu, Ge, Kr, Mo, Xe, W. БД организованы в виде структурированных текстовых файлов, каждый из которых содержит форматированную информацию по отдельному элементу.

Генерируемые БД «ТОТ-термодинамика» содержат результаты численного определения ионизационного состава и термодинамических свойств (давление, внутренняя энергия, энтропия, энтальпия, изобарная и изохорная теплоемкости,

показатели адиабаты, уравнения состояния, скорость звука) плазмы элементов полимерного ряда как функций от плотности и температуры (в диапазонах по плотности от 0.0001 до 100 кг/м³ и температуры от 5 до 5000 кК) (рис. 1, 3). В основу расчета ионизационного состава и термодинамических функций плазмы положено уравнение Саха-Эккерта с учетом неидеальности плазмы в приближении Дебая-Хюккеля в большом каноническом ансамбле [5, 6]. Расчет статсумм проводится с использованием баз данных по энергетическим уровням атомов и ионов элементов, входящих в смесь и «обрезанием» на среднем межчастичном расстоянии с введением экспоненциального форм-фактора [5, 7]. БД «ТОТ-транспорт» включают в себя данные по транспортным свойствам (электропроводность, полная теплопроводность, электронная, ионная, реактивная теплопроводности, вязкость) плазмы элементов полимерного ряда как функций от плотности и температуры (в диапазонах по плотности от 0.0001 до 10 кг/м³ и температуры от 5 до 5000 кК) (рис. 2). Вычисление коэффициентов переноса базируется на принципе раздельного описания процессов электронного и ионного переноса [8 – 10]. Электронные коэффициенты переноса рассчитываются по формулам Фроста [8], ионные коэффициенты переноса вычисляются методами Чепмена-Энскога [9]: вязкость – методом первого порядка, ионная теплопроводность – методом второго порядка. Потенциалы взаимодействия тяжелых заряженных частиц считались кулоновскими, экранированными по Дебаю.

Следует отметить, что данные по ионизационному составу, термодинамическим функциям, транспортным свойствам, базы данных по квантовомеханическим состояниям и сечениям элементарных процессов атомов и ионов представляют самостоятельный практический интерес. Сравнение экспериментальных и расчетных данных проведенное в широком диапазоне параметров ряда рабочих веществ и их составляющих (алюминий, аргон, водород, углерод и др.) показывают их удовлетворительное соответствие [3].

Таким образом, создана АСНИР термодинамических и транспортных свойств – как универсальный инструмент экспресс-анализа термодинамических характеристик и транспортных свойств широкого класса рабочих веществ и конструкционных материалов энергетических и технологических установок, которая позволяет оценить эффективность преобразования энергии в них, оптимизировать их энергомассовое совершенство.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бойко Ю.П. и др. *Термодинамические и оптические свойства плазмы металлов и диэлектриков / Под ред. Ю.С.Протасова.* - М.: Металлургия, 1988.-356 с.
2. Бойко Ю.П. и др. *Термодинамические и оптические свойства ионизованных газов при температурах до 100 эВ / Под ред. Ю.С.Протасова.*-М.: Энергоатомиздат, 1988.-192 с.
3. Корышев О.В. и др. *Термодинамические, оптические и транспортные свойства рабочих веществ плазменных и фотонных энергетических установок. Т.1 / Под ред. Ю.С. Протасова.*- М.: Изд. МГТУ им. Н.Э.Баумана, 1999. – 640 с.
4. Протасов Ю.Ю., Телех В.Д. *Термодинамические, оптические и транспортные свойства рабочих веществ плазменных и фотонных энергетических установок. Т.2 / Под ред. Ю.С. Протасова.*- М.: Изд. МГТУ им. Н.Э.Баумана, 2000. – 720 с.
5. Грязнов В.К. и др. *Теплофизические свойства рабочих сред газозащитного ядерного реактора. / Под ред. В.М. Иевлева.*- М.: Атомиздат, 1982.- 304 с.
6. Бушман А.В., Фортон В.Е. // *Успехи физических наук.* 1983. Т. 40, № 2. С. 177.
7. Волокитин В.С., Калиткин Н.Н. // *Математическое моделирование.* 1991. Т.3, №5. С.49
8. Митчнер М., Кругер Ч. *Частично ионизованные газы.* –М.: Мир, 1976. –406 с.
9. Алексеев Б.В., Грушин И.Т. *Процессы переноса в реагирующих газах и плазме.* –М.: Энергоатомиздат, 1994. –432 с.
10. Соколова И.А. // *Математическое моделирование.* 1998. Т.10, №2. С. 25.

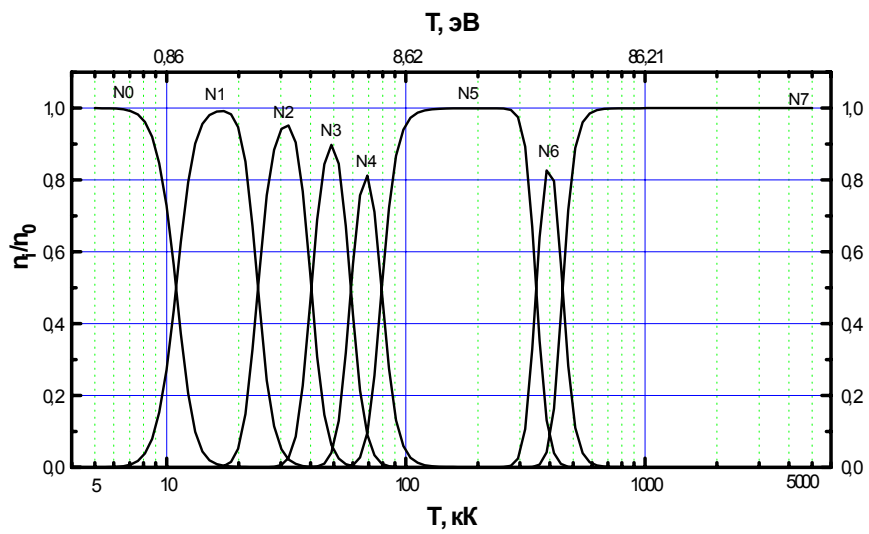
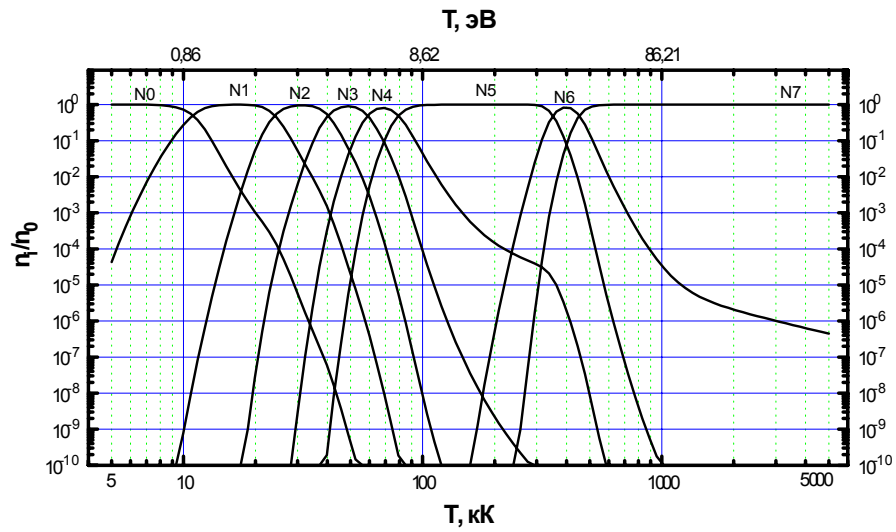


Рис. 1. Ионизационный состав плазмы азота при $\rho = 10^{-4}$ кг/м³

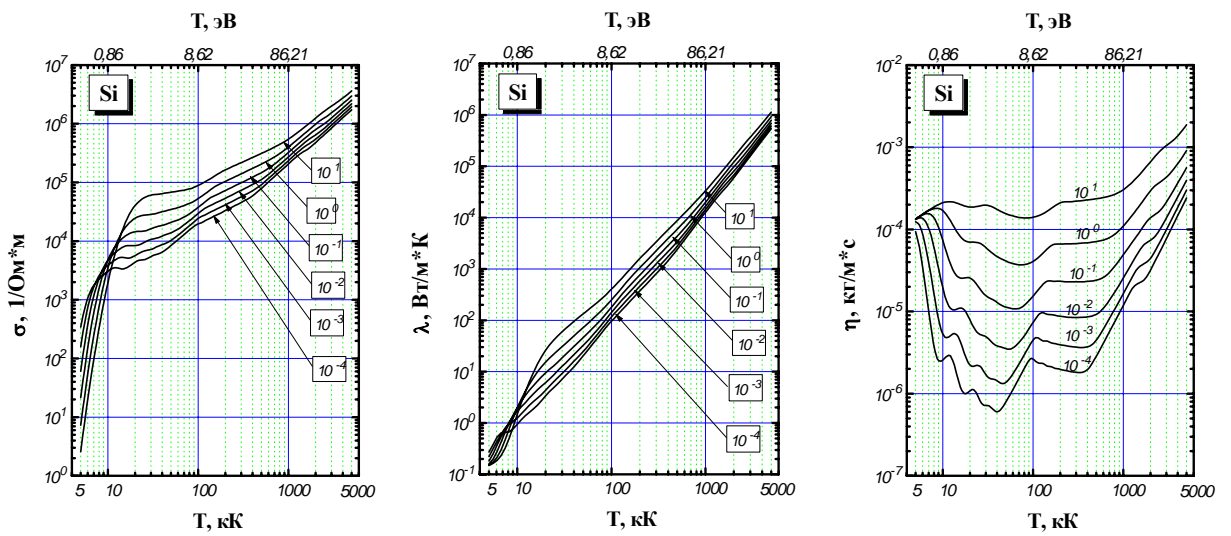


Рис. 2. Транспортные свойства плазмы кремния

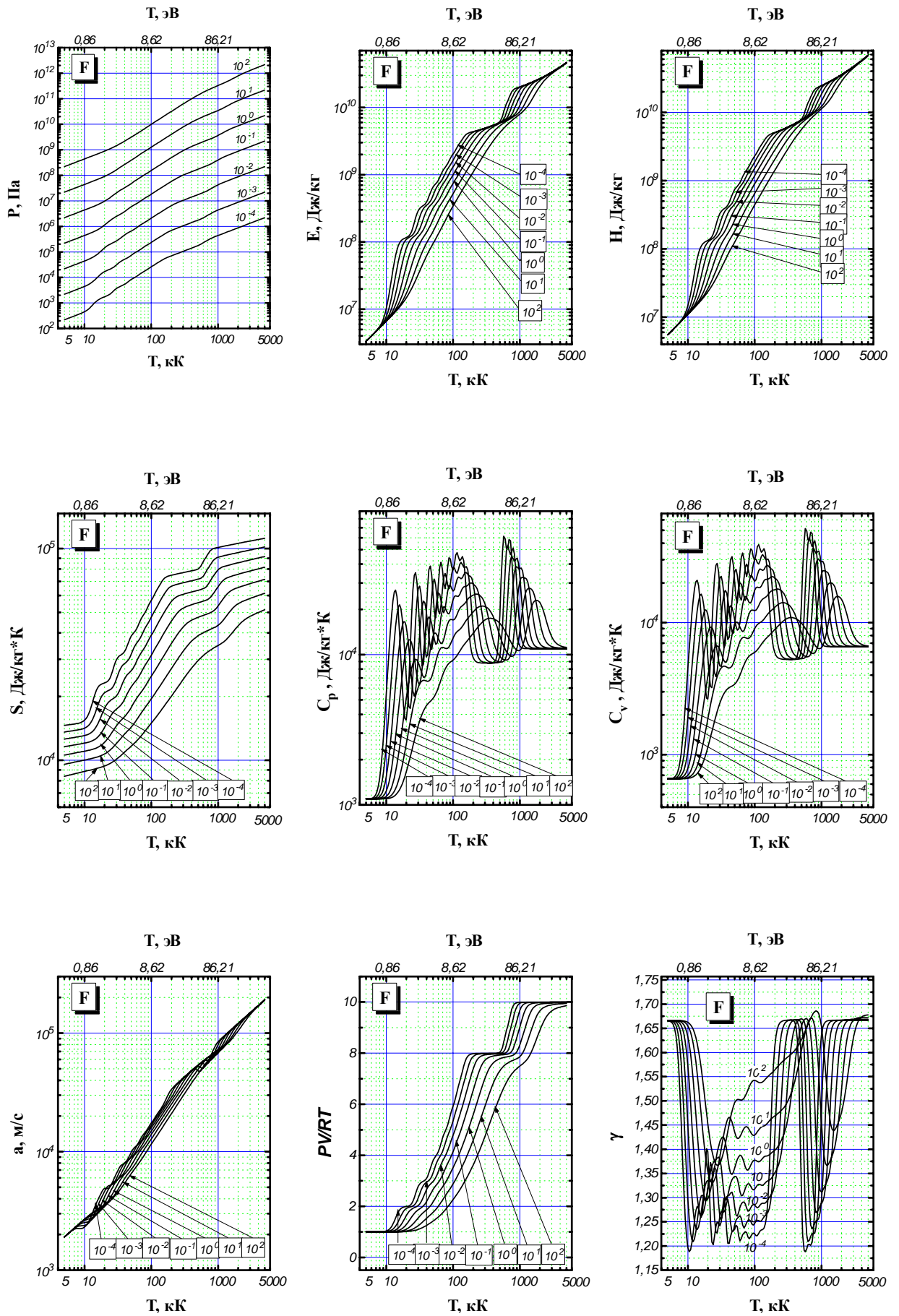


Рис. 3. Термодинамические свойства плазмы фтора