

КАЗАНСКИЙ (ПРИВОЛЖСКИЙ) ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ОТЧЕТ

по теме:

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАЗОДИНАМИКИ ПОТОКА
ВЫСОКОЧАСТОТНОЙ ПЛАЗМЫ ПОНИЖЕННОГО ДАВЛЕНИЯ ДЛЯ ОБРАБОТКИ
ПОЛИМЕРНЫХ И НЕОРГАНИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Руководитель НИР



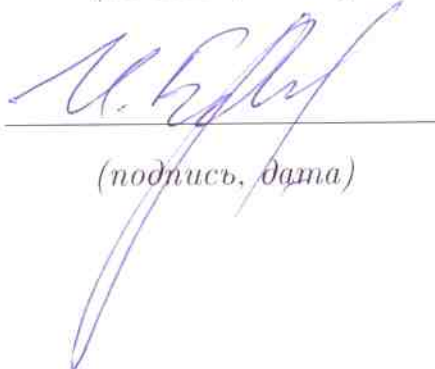


подпись, дата

А.Ю. Шемахин

Казань 2013

Список исполнителей

Руководитель темы, ассистент	 _____ (подпись, дата)	А.Ю. Шемахин
Д-р физ.-мат. наук, профессор	 _____ (подпись, дата)	В.С. Желтухин
Студент	 _____ (подпись, дата)	И.А. Бородаев

Реферат

ВЫСОКОЧАСТОТНАЯ ПЛАЗМА, МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, ПОНИЖЕННОЕ ДАВЛЕНИЕ, СТРУЙНОЕ ТЕЧЕНИЕ, МЕТОД ПРЯМОГО СТАТИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ, ВЧ-ПЛАЗМЕННАЯ ОБРАБОТКА

Объектом исследования является струя высокочастотной плазмы пониженного давления.

Плазма высокочастотных (ВЧ) разрядов пониженного давления ($p=13.3-133$ Па) с продувом газа эффективно применяется для модификации (в том числе на уровне наноструктуры) различных материалов, таких как сталь, титан, полиэтилен, кожа, мех и др. Для эффективного управления параметрами обработки полимерных и неорганических материалов в среде ВЧ-плазмы пониженного давления требуется информация о характеристиках плазменного потока: пространственном распределении газовой и электронной температуры, концентрации заряженных частиц и др.

Целью проекта является создание математической модели и исследование свойств потока ВЧ-плазмы пониженного давления в переходном режиме течения в диапазоне чисел Кнудсена $8 \cdot 10^{-3} < Kn < 7 \cdot 10^{-2}$. Это связано с необходимостью подбора параметров течения ВЧ-плазмы для обработки полимерных и неорганических материалов.

В ходе проекта разработаны математическая модель и численный метод для моделирования струйного течения нейтральной и заряженной компонент ВЧ-плазмы при пониженных давлениях, комплекс программ для расчета двухкомпонентного струйного течения ВЧ-плазмы при пониженных давлениях. Проведены численные эксперименты по расчету газодинамических параметров ВЧ-плазмы пониженного давления для невозмущенной струи и струи с образцом. Определены газодинамические параметры

плазмы вблизи обрабатываемого изделия. Даны рекомендации по режимам течения рабочего газа и оптимальной зоне обработки материалов при давлении 13.3-133 Па для различных степеней ионизации и термической неравновесности ВЧ-плазмы пониженного давления в диапазоне чисел Кнудсена для несущего газа $8 \cdot 10^{-3} < Kn < 7 \cdot 10^{-2}$.

В рамках выполнения проекта опубликовано 11 работ.

Содержание

ОПРЕДЕЛЕНИЯ, ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ	7
ВВЕДЕНИЕ	10
1. Разработка математической модели и численного метода для моделирования струйного течения нейтральной и заряженной компонент ВЧ-плазмы при пониженных давлениях	15
1.1 Оценка основных параметров ВЧ-плазмы пониженного давления	15
1.2 Математическая модель струйного течения ВЧ-плазмы пониженного давления с продувом газа	19
1.3 Разработка численного метода решения задачи струйного течения ВЧ-плазмы пониженного давления	23
1.3.1 Численный метод расчета основных характеристик струйного течения ВЧ-плазмы пониженного давления	23
1.3.2 Методика проведения численных экспериментов расчета газодинамики ВЧ-плазмы пониженного давления	26
2. Разработка комплекса программ для расчета двухкомпонентного струйного течения ВЧ-плазмы при пониженных давлениях	27
2.1 Описание алгоритма и программного комплекса для расчета основных характеристик струйного течения ВЧ-плазмы пониженного давления	27
2.2 Состав пакета («case» в терминологии OpenFOAM) для проведения расчетов	31
3. Проведение численных расчетов параметров струйного течения ВЧ-плазмы пониженного давления для вакуумной камеры ВЧ-плазменной установки в модели с образцом и определение газодинамических параметров плазмы вблизи обрабатываемого изделия	32

3.1 Модификация программного комплекса для расчета течения ВЧ-плазмы при наличии в струе образца	32
3.2 Параметры расчетов	34
3.3 Концентрация электронов	35
3.4 Электронная температура	37
3.5 Давление несущего газа	41
3.6 Скорость несущего газа	43
3.7 Температура несущего газа и эффект перегрева в некоторых режимах течения	44
4. Разработка рекомендаций по режимам течения рабочего газа и оптимальной зоне обработки материалов при давлении 13.3-133 Па для различных степеней ионизации и термической неравновесности ВЧ-плазмы пониженного давления в диапазоне чисел Кнудсена для несущего нейтрального газа $8 \cdot 10^{-3} < \text{Kn} < 7 \cdot 10^{-2}$	50
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	52
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	54

Список обозначений

В настоящем отчете о НИР применяют следующие термины с соответствующими определениями:

Высокочастотный разряд — электрический разряд в газе, возникающий в электрическом поле высокой частоты.

Электрический разряд в газе — совокупность процессов, возникающих при протекании электрического тока через вещество, находящееся в газообразном состоянии. Для возникновения и поддержания газового разряда требуется существование электрического поля, так как плазма может существовать, только в случае, если электроны приобретают во внешнем поле энергию, достаточную для ионизации атомов, и количество образованных ионов превышает число рекомбинировавших ионов.

Плазма — полностью или частично ионизированный газ, квазинейтральное состояние разноименных заряженных частиц, демонстрирующих коллективное поведение.

Ионизированный газ — состояние газа, когда от электронных оболочек значительной части атомов или молекул отделён по крайней мере один электрон.

Квазинейтральный — означает, что несмотря на наличие свободных зарядов (электронов и ионов), суммарный электрический заряд плазмы приблизительно равен нулю.

Ион — одноатомная или многоатомная электрически заряженная частица, образующаяся в результате потери или присоединения одного или нескольких электронов атомом или молекулой.

В настоящем отчете о НИР применяют следующие условные обозначения:

В — вектор магнитной индукции;

\mathbf{v}_a	— вектор скорости газового потока, вектор скорости нейтральных частиц в плазме (средняя, среднемассовая скорость);
\mathbf{v}_e	— вектор макроскопической скорости электронов;
\mathbf{D}	— вектор электрического смещения;
D_a	— коэффициент амбиполярной диффузии;
e	— заряд электрона;
E	— модуль напряженности электрического поля;
E_I	— потенциал ионизации;
\mathbf{E}	— вектор напряженности электрического поля;
f	— частота генератора;
G	— расход газа;
\mathbf{H}	— вектор напряженности магнитного поля;
\mathbf{j}	— вектор плотности тока;
k_B	— постоянная Больцмана;
\bar{l}_e, \bar{l}_i	— средние длины свободного пробега электронов и ионов;
m_a, m_e, m_i	— масса атома, электрона, иона;
μ_0	— магнитная постоянная;
ν_c	— частота упругих столкновений электронов с атомами и ионами;
ν_i	— частота ионизации;
\mathbf{n}	— внешняя нормаль к границе области;
n_e	— концентрация электронов;
\mathbf{c}	— вектор молекулярной скорости нейтрального газа;
\mathbf{c}'	— тепловая, собственная или случайная скорость молекул;
$f(\mathbf{c}, \mathbf{r}, t)$	— функция распределения по скоростям;
T_{inlet}	— температура несущего газа на входе в вакуумную камеру;
v_{inlet}	— скорость несущего газа на входе в вакуумную камеру;

p, p_a	—	давление плазмообразующего газа;
P_d	—	мощность, выделяемая в разряде;
$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$	—	текущая радиальная координата;
r_D	—	дебаевский радиус;
R_{rk}	—	радиус разрядной камеры;
R_{vk}	—	радиус вакуумной камеры;
L_{vk}	—	длина вакуумной камеры;
t	—	время;
T_a, T_i, T_e	—	температуры атомов, ионов, электронов;
$\delta = m_e/2m_a$	—	доля энергии, передаваемая электронами атомам и ионам в упругих столкновениях;
ε	—	относительная диэлектрическая проницаемость;
ε_0	—	электрическая постоянная;
λ_e	—	коэффициент теплопроводности электронного газа;
ρ	—	плотность газа;
σ	—	проводимость плазмы;
$\omega = 2\pi f$	—	круговая частота электромагнитного поля;
Kn	—	число Кнудсена;
\mathbf{r}	—	радиус - вектор;
$S(f)$	—	интеграл столкновений.

В настоящем отчете о НИР применяют следующие сокращения:

ВЧ	—	высокочастотный;
ВЧИ	—	высокочастотный индукционный;
КПД	—	коэффициент полезного действия;
СЛАУ	—	система линейных алгебраических уравнений;
3D	—	трёхмерное пространство;
ПО	—	программное обеспечение.

Введение

При проектировании современных трубопроводов и ледостойких конструкций некоторые важные материалы могут быть заменены на полимерные и металлические с повышенной износостойкостью, прочностью и другими качественно новыми характеристиками. Современные технологии обработки пластмасс в высокочастотной (ВЧ) плазме пониженного давления позволяют повысить ее прочность, морозо- и тепло- стойкость за счет объемной модификации. Удастся добиться повышения прочности некоторых материалов в 1,5-2 раза. Описанные возможности позволяют создавать и использовать полученные материалы в экстремальных областях Арктики и космического пространства. Обработка материалов различной природы происходит в ВЧ-установках струей ВЧ-плазмы пониженного давления. Для усовершенствования процесса обработки необходимо найти зону оптимальной обработки материалов различной природы, тем самым получив возможность равномерного воздействия на обрабатываемый материал [1].

Плазма ВЧ-разрядов пониженного давления ($p = 13.3 - 133$ Па) с продувом газа применяется для модификации поверхностей различных материалов, таких как сталь, титан, полиэтилен, и др. Плазма ВЧ-разряда обладает следующими преимуществами: эффективно и устойчиво изменяет поверхностные свойства образца, не ухудшает объемных (в том числе физико-механических) характеристик, не нагревает материал до температуры, вызывающей его расплавление или деструкцию. Изменяя параметры разряда и вид плазмообразующего газа можно управлять составом химически активных частиц и, следовательно, характером воздействия ВЧЕ разряда на полимерные материалы. Сильная неравновесность плазмы, генерируемая ВЧЕ разрядом пониженного давления с энергией частиц до 100 эВ, приводит к модификации не только наружных поверхностных слоев полимеров, но и в объеме материала, при этом обрабатываемый в плазме мате-

риал остается холодным, что позволяет с помощью плазменного потока получать эффекты, недостижимые другими видами плазменного воздействия [2–7, 30].

Плазма, создаваемая данным видом разряда, обладает следующими свойствами: степень ионизации $10^{-4} - 10^{-7}$, концентрация электронов $n_e = 10^{15} - 10^{19} \text{ м}^{-3}$, электронная температура $T_e = 1 - 4 \text{ эВ}$, температура атомов и ионов в плазменном сгустке $T_a = 0.2 - 0.3 \text{ эВ}$, в плазменной струе $T_a = 0.03 - 0.07 \text{ эВ}$.

За последние десятилетия накоплены обширные экспериментальные данные о свойствах плазмы ВЧ-разрядов пониженного давления, результатах взаимодействия ее с различными материалами, созданы математические модели, учитывающие электродинамику и плазмодинамику ВЧ-разрядов [2, 3]. Однако, параметры течения ВЧ-плазмы получены эмпирическим путем в лабораторных условиях для ограниченного набора параметров разрядов и плазмотронов, а существующие математические модели ВЧ-плазмы пониженного давления, не учитывают адекватно газодинамику потока струи и тем самым не рассматривают всю картину технологического процесса обработки материалов.

Для более эффективного проектирования технологических процессов с использованием струйных ВЧ-разрядов пониженного давления необходимо создание математической модели течения ВЧ-плазмы, с помощью которой можно проводить исследования закономерностей формирования характеристик потока плазмы, а, следовательно, и параметров плазменной обработки путем численных расчетов, что уменьшает затраты на проведение большого количества дорогостоящих и трудоемких экспериментов. В связи с этим, задача моделирования газодинамики струй ВЧ-плазмы пониженного давления является актуальной.

Одним из параметров, определяющих характер течения газа является число Кнудсена. Число Кнудсена Kn для нейтрального газа находится в

диапазоне $8 \cdot 10^{-3} \leq Kn \leq 7 \cdot 10^{-2}$. При этом числа Кнудсена для электронного газа $10^{-3} \leq Kn \leq 10^{-1}$, для газа ионов $5 \cdot 10^{-4} \leq Kn \leq 5 \cdot 10^{-3}$. Поэтому в диапазоне давлений $p = 13.3 - 133$ Па при расходе газа $G = 0 - 0.25$ г/с течение нейтрального газа происходит в переходном режиме между течением сплошной среды и свободно-молекулярным потоком.

Квазинейтральная плазма характеризуется коллективным взаимодействием заряженных частиц. При разделении заряженных частиц возникают значительные кулоновские силы, которые притормаживают электроны и ускоряют ионы. В результате электроны и ионы диффундируют в парах. Таким образом, в квазинейтральной плазме средние скорости электронов и ионов равны, поэтому для оценки характера течения заряженной компоненты плазмы целесообразно использовать число Кнудсена для ионов. Таким образом специфической особенностью течения плазмы ВЧ-разряда пониженного давления является сочетание переходного режима для нейтральной компоненты и режима сплошной среды для заряженной компоненты.

Анализ литературных данных показал, что газодинамические модели, захватывающие часть диапазона переходного режима течения газа, характеризуются тремя подходами:

- 1) модели уравнений Навье-Стокса в первом приближении [8],
- 2) модели уравнений Навье-Стокса с введенной второй вязкостью [9],
- 3) статистические модели Монте-Карло, основанные на уравнении Больцмана [10].

Первые два подхода к моделированию течений газа успешно применяются для режима сплошной среды и захватывают часть диапазона переходного режима течения ($Kn \leq 10^{-2}$). Третий подход, в основном, применяется для свободно-молекулярного режима течения газа ($Kn \geq 1$).

Для моделирования газодинамики потоков низкотемпературной плазмы обычно применяют модель сплошной среды, однако, в диапазоне давле-

