

Аннотация:

В виду широкого распространения холодных плазменных струй в медицине, возникает необходимость в увеличении их эффективности при обработке биологических тканей. Важными вопросами являются исследование распределения электрического поля у поверхности и выявление параметров, способствующих наиболее интенсивной генерации активных радикалов, таких как O_3 , H_2O_2 , OH и т. д. Чтобы смоделировать процесс взаимодействия плазменной струи с поверхностью, в работе численно решалось уравнение Больцмана для расчёта распределения кинетических коэффициентов, а также, численно решалась система из 98 обычных дифференциальных уравнений химической кинетики для нахождения состава смеси над обрабатываемой поверхностью и исследования возникающих плазмохимических процессов. Был составлен и реализован алгоритм решения жёсткой системы дифференциальных уравнений и проведён анализ относительных вкладов различных реакций в генерацию важных с точки зрения медицинских приложений радикалов.

Вагапов Сергей Анатольевич, студент НГУ ФФ 4 курс

Тема работы: «Моделирование кинетических коэффициентов для переноса электронов в волне ионизации распространяющейся по струе гелия вытекающей в атмосферу и описание сопутствующих плазмохимических процессов»

Научный руководитель: д. ф-м. н., в. н. с. И. В. Швейгерт (ИТПМ)

Холодные плазменные струи является широко используемым инструментом в медицине. Они активно применяются в дерматологии, стоматологии, косметологии и онкологии. В виду наличия большого количества ионов и метастабильных состояний атомов и молекул в плазме, при контакте плазменной струи с атмосферой генерируется огромное количество активных радикалов, благоприятно воздействующих на живые клетки. В то же время, плазменные струи абсолютно безвредны для биологической ткани, так как их температура очень близка к комнатной.

Для медицинских приложений возникает необходимость в усилении генерации отдельного радикала или группы радикалов. При этом состав воздуха над обрабатываемой поверхностью зависит от множества параметров, таких как напряжение на аноде, диаметр трубки, скорость прокачки газа, влажность воздуха, наличие дополнительных газов и т.д. Найти оптимальные параметры для усиления генерации экспериментальными методами сложно, так как число параметров велико, а эксперимент связан с финансовыми и временными затратами. Кроме того, цепочки плазмохимических реакций достаточно запутанны и для выявления основных тенденций необходимо численное моделирование.

Цель данной работы – расчёт кинетических коэффициентов для моделирования процессов взаимодействия плазменной струи с окружающим воздухом и исследование возникающих плазмохимических процессов. Выявление основных путей образования наиболее важных для медицинских приложений радикалов. Оценка состава смеси над обрабатываемой поверхностью.

Работа проводится в несколько этапов:

- 1) Решение уравнений Навье-Стокса для получения распределения молярных долей компонент исходной смеси ($He + O_2 + N_2 + H_2O$)
- 2) Решение уравнения Больцмана для получения кинетических коэффициентов

- 3) Решение уравнения динамики волны ионизации в плазменной струе для получения распределения плотностей электронов и ионов и энергии электронов
- 4) Решение уравнений химической кинетики

Кластер ИВЦ НГУ использовался для выполнения этапов 2 и 4. Используя полученные на первом этапе распределения молярных долей компонент исходной

смеси, в каждой точке численно решалось уравнение Больцмана, находилась функция распределения электронов по энергиям, находились пространственные распределения кинетических коэффициентов для различных электрических полей. К этим коэффициентам относятся коэффициент диффузии электронов, подвижность электронов и их энергии, коэффициенты скорости ионизации и возбуждения электронным ударом. Для примера, на рис. 1 изображено распределение коэффициента скорости ионизации для поля 25 кВ/см, для двух скоростей истечения гелия – 4 л/мин (слева) и 13.5 л/мин (справа). На рис. 2 изображено сравнение расчётных коэффициентов скорости ионизации для различных газов в зависимости от удельного электрического поля с экспериментом.

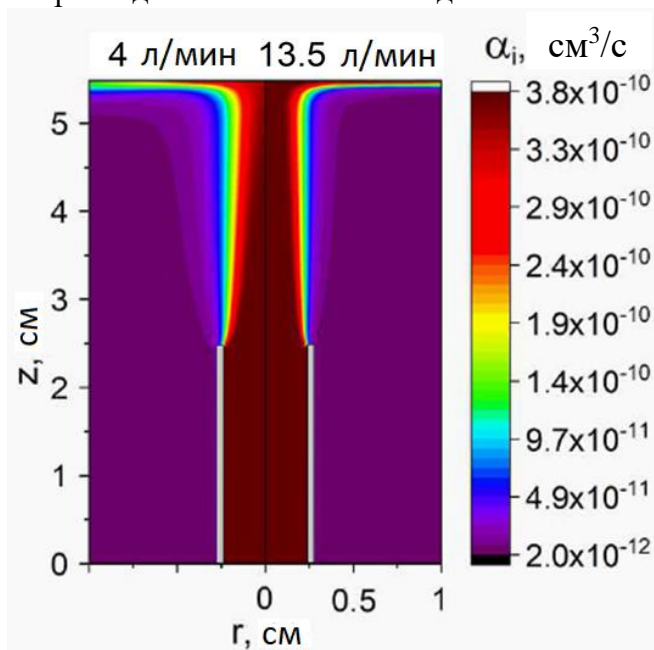


Рис. 1. Распределение коэффициента скорости ионизации для электрического поля 25 кВ/см для скоростей истечения гелия 4 л/мин (слева) и 13.5 л/мин (справа)

Полученные коэффициенты использовались в правых частях уравнений из 3-го этапа – уравнения сохранения числа частиц электронов и ионов, уравнение сохранения энергии, уравнение Пуассона. В результате их решения были получены распределения плотности электронов, их энергии, электрического поля, а также проводимости и тока (расчёт проводился научным руководителем – И. В. Швейгерт).

Далее, для получения состава смеси у поверхности, используя полученные значения плотности электронов и их энергии у поверхности в качестве начальных данных, решались уравнения химической кинетики в 0-мерной постановке. 0-мерная постановка задачи означает, что все пространственные производные принимались равными нулю, то есть рассматривалась только эволюция во времени. Такой подход позволяет сильно расширить набор химических реакций.

Расчёт проводился для пристеночного пограничного слоя, что позволяет не учитывать конвекционные потоки. Расстояние от оси было выбрано за 0.16 см, что соответствует положению головы стримера. Молярная доля гелия в этой точке варьируется от 0.9763 до 0.9999. Расчёт проводился для различных влажностей воздуха: 10%, 50% и 90%. 2-мерный расчёт показывает, что энергия электронов за рассматриваемое время (~5 мкс) слабо меняется со временем, поэтому энергия электронов бралась постоянной и равнялась 7.5 эВ, 5 эВ и 3 эВ. Концентрация электронов $n_e = 2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$. Кинетическая схема включает в себя 822 химические реакции и 98 компонент, включая положительные и отрицательные ионы, возбужденные состояния и нейтральные частицы. Реакции и константы скорости их протекания брались из различных литературных источников. 190

реакций были с участием электронов – это реакции ионизации, возбуждения, диссоциации и присоединения. Для вычисления скоростей этих реакций численно решалось уравнение Больцмана, используя текущий состав смеси и сечения рассеяния соответствующих процессов (сечения взяты из онлайн базы данных www.lxcat.net). Коэффициенты формировались в виде таблиц для различных электрических полей и периодически обновлялись из решения уравнения Больцмана.

Таким образом, решаемые уравнения принимают вид:

$$\frac{\partial n_{\alpha}}{\partial t} = \sum_{\lambda=1}^J (v_{\alpha\lambda}^R - v_{\alpha\lambda}^L) k_{\lambda} \prod_{l=1}^N n_l^{v_{\alpha\lambda}^L}$$

$$T_e = const$$

Для решения системы этих уравнений использовались методы Эйлера, Розенброка и Рунге-Кутты 2-го и 4-го порядков с адаптивным шагом – шаг подбирался таким, чтобы решение для каждой компоненты с вдвое меньшим шагом по времени отличалось от исходного менее, чем на 0.1%.

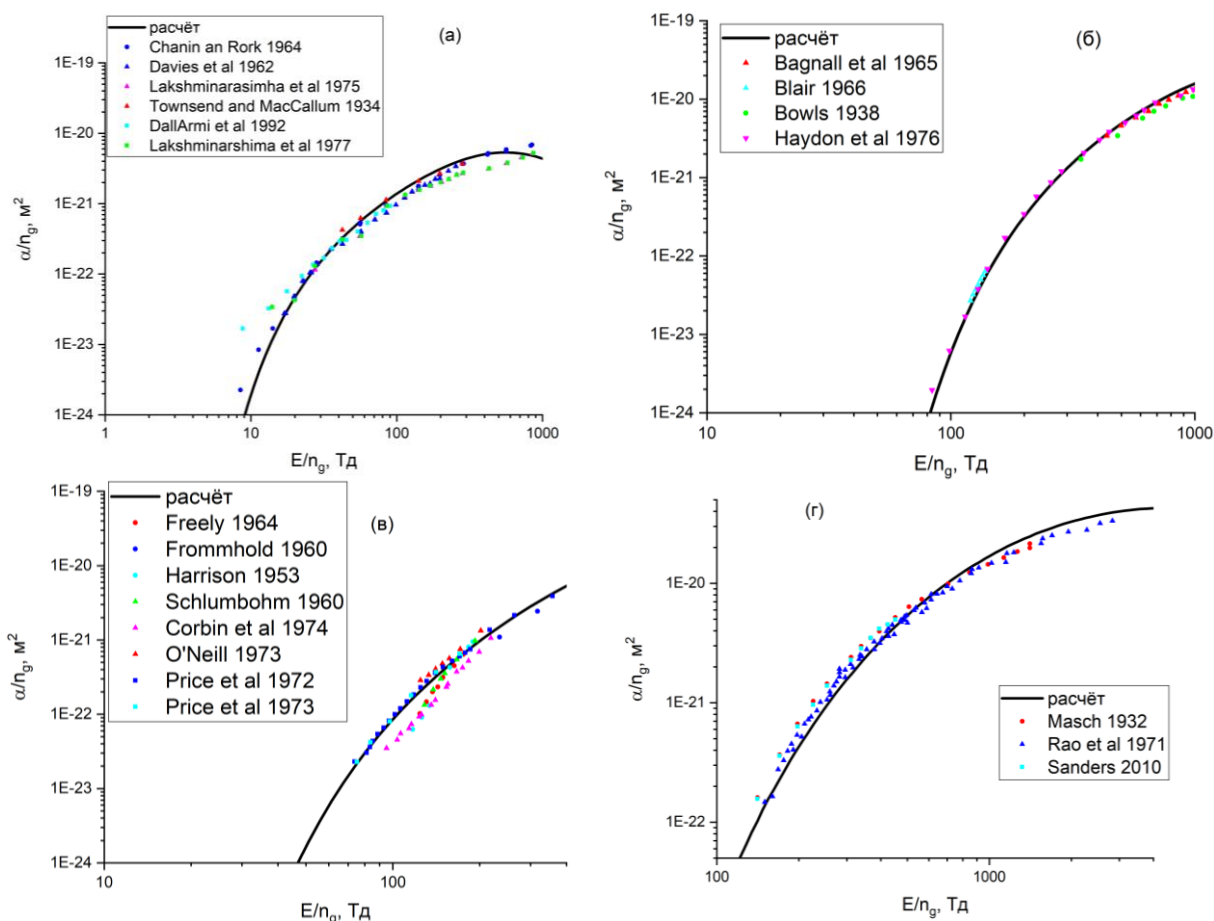


Рис. 2. Расчётные значения коэффициентов скорости ионизации (сплошная линия) в зависимости от удельного электрического поля для гелия (а), азота (б), кислорода (в) и воздуха: (г)

В результате решения этих уравнений были получены зависимости концентраций частиц от влажности воздуха и энергии электронов (рисунки 3 и 4, соответственно).

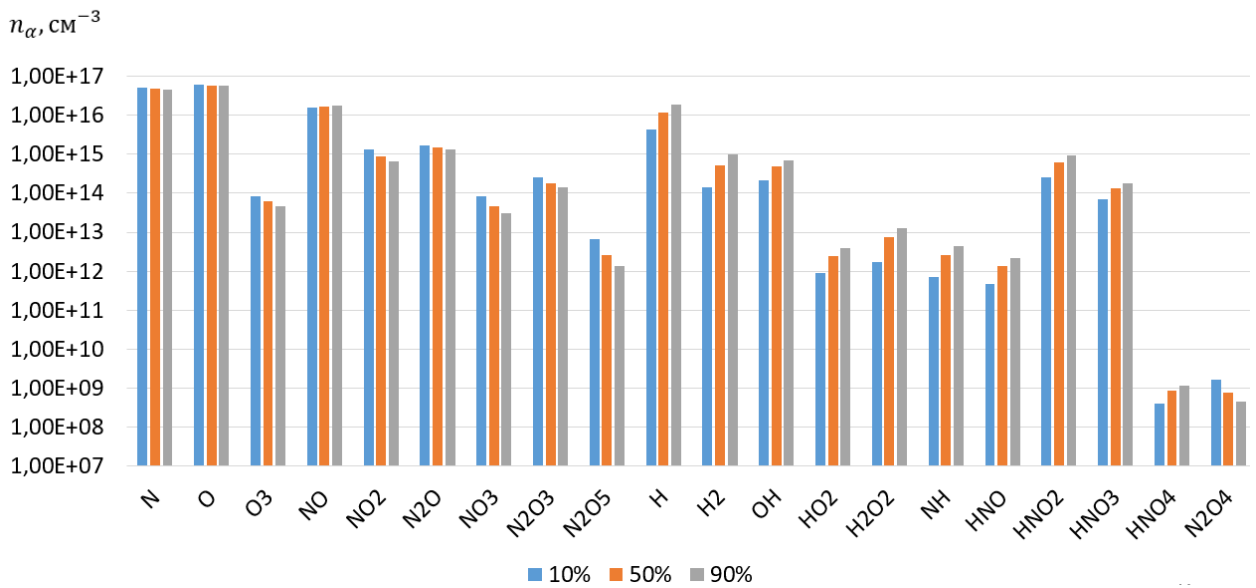


Рис. 3. Концентрации нейтральных частиц в момент времени $t = 5$ мкс для различных влажностей при $T_e = 7.6$

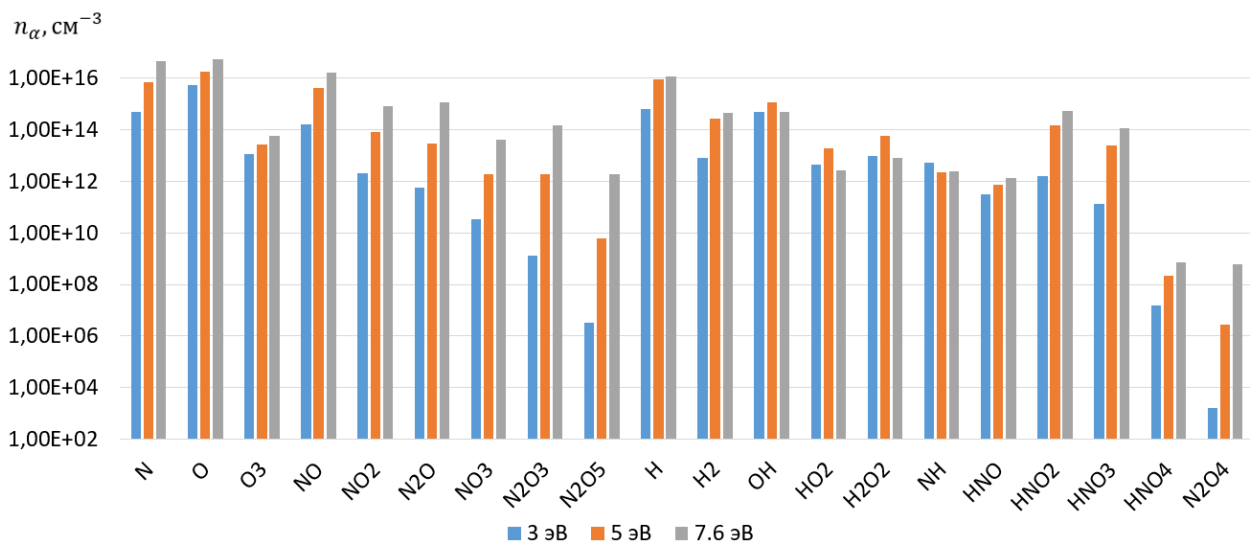
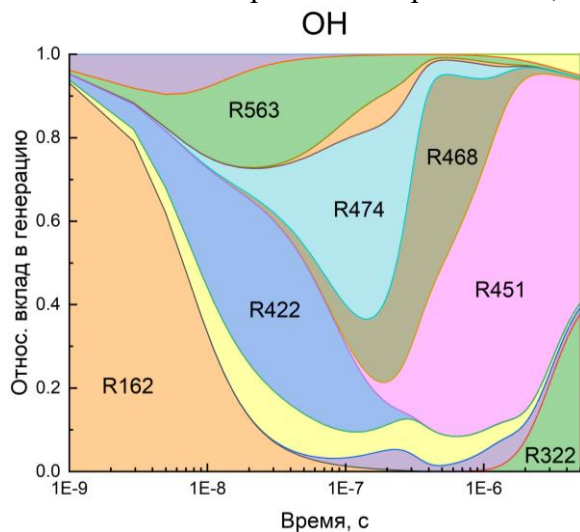


Рис. 4. Концентрации нейтральных частиц в момент времени $t = 5$ мкс для различных электронных температур при 50% влажности

Как и следовало ожидать, наиболее чувствительными к влажности воздуха оказались водородосодержащие радикалы. По мере роста влажности, концентрации изменялись примерно на порядок величины. Концентрации наиболее важных для медицинских приложений радикалов варьировались от десятых долей ппм (миллионная доля) до нескольких десятых процентов, чего вполне достаточно для оказания биологического эффекта. Зависимость концентраций от энергии электронов выражена более ярко. Концентрации варьируются на несколько порядков по мере роста энергии электронов. При более высоких энергиях концентрации различных оксидов азота (N_xO_y) были больше, ввиду более интенсивной генерации атомарных азота и кислорода за счёт электронного удара.

Также, интерес представляет выявление наиболее важных реакций для порождения того или иного радикала. Выявление наиболее значимых реакций поможет, также, составить сокращённый набор химических реакций, который в дальнейшем может быть

использован в численных моделях более высокого уровня (1D, 2D) для проведения более точного анализа плазмохимических процессов. На рисунках с 5 по 8 изображены относительные вклады различных реакций в генерацию наиболее важных с точки зрения медицинских приложений радикалов, а также иона молекулярного азота.



Реакции, вносящие наибольший вклад:

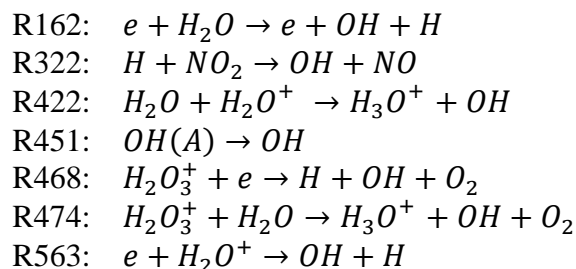
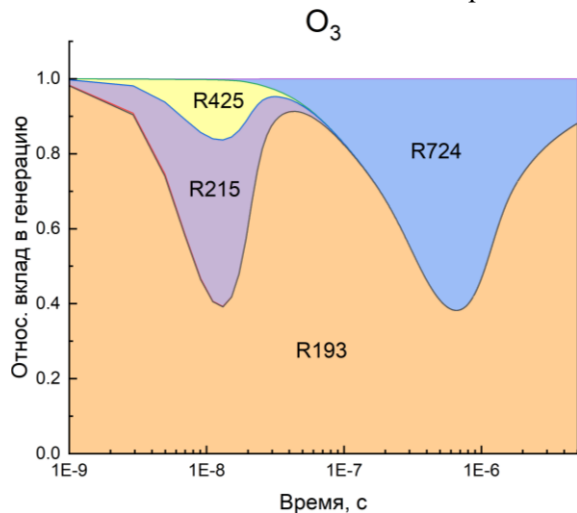


Рис. 5. Относительный вклад в генерацию OH



Реакции, вносящие наибольший вклад:

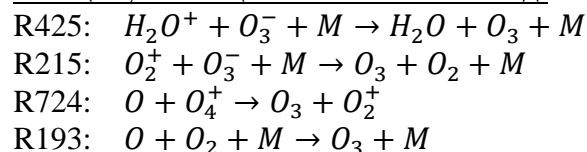
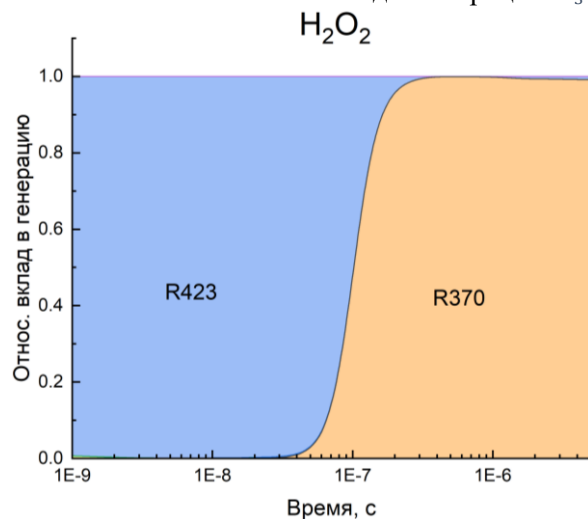


Рис. 6. Относительный вклад в генерацию O_3



Реакции, вносящие наибольший вклад:

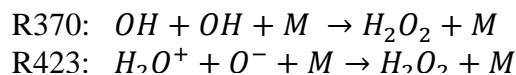
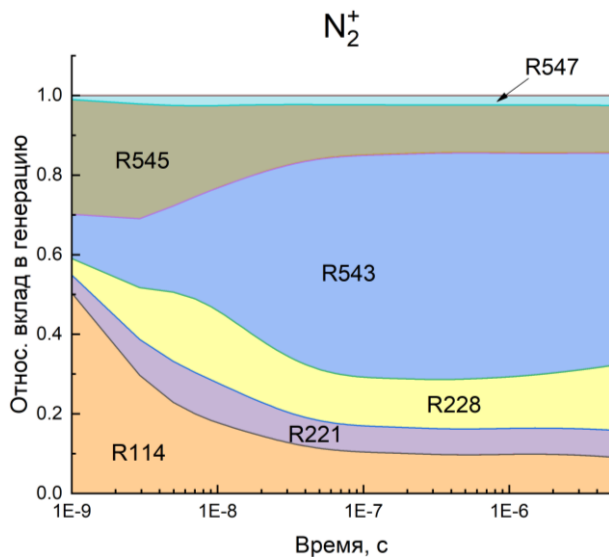


Рис. 7. Относительный вклад в генерацию H_2O_2



Реакции, вносящие наибольший вклад:

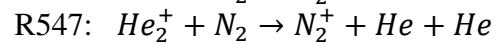
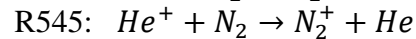
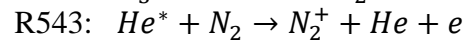
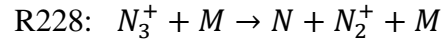
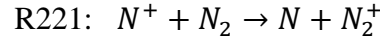
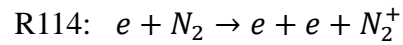


Рис. 8. Относительный вклад в генерацию N_2^+

Таким образом, было выявлено, что наиболее важными реакциями для генерации радикалов являются реакции диссоциации с последующей рекомбинацией, перезарядки и рекомбинации электронов с ионами. Начиная с некоторого момента реакция ионизации Пеннинга начинает играть доминирующую роль в генерации ионов молекулярного азота.

Список публикаций:

- 1) Interaction of streamer propagating over helium jet with surface INTERNATIONAL CONFERENCE ON THE METHODS OF AEROPHYSICAL RESEARCH (ICMAR 2018), Irina Schweigert, S. Vagapov, E. Yelak, P.P. Gugin, D.E. Zakrevsky. DOI: 10.1063/1.5065330
- 2) Plasma Jet Interaction with Dielectric Surface 2018 Irina Schweigert, S Vagapov, L Lin, M Keidar, Journal of Physics Conference Series 1112(1):012004, 2018. DOI: 10.1088/1742-6596/1112/1/012004
- 3) Enhancement of Atmospheric Plasma Jet - Target Interaction with External Ring Electrode Irina V Schweigert, Sergey Vagapov, Li Lin and Michael Keidar J. Phys. D: Appl. Phys. 2019. DOI: 10.1088/1361-6463/ab1319
- 4) Experimental and theoretical study of cold atmospheric plasma jet interaction with metal and dielectric surfaces, Irina Schweigert, Sergey Vagapov. Li Lin, Michael Keidar, APS Gaseous Electronics Conference 2018, abstract id.PR2.001

Конференции:

- 1) XVII Международное Совещание по Магнитоплазменной Аэродинамике
- 2) XVIII Международное Совещание по Магнитоплазменной Аэродинамике
- 3) APS Gaseous Electronics Conference 2018
- 4) ICMAR 2018