

Вагапов Сергей Анатольевич, студент НГУ ФФ 1 курс магистратуры.

**Научный руководитель:** д. ф-м н., в.н.с. Швейгерт Ирина Вячеславовна

**Предполагаемая тема квалификационной работы:** Численное моделирование диффузии радикалов, индуцированных холодной плазменной струёй, в жидкость для определения осмотического давления

## ОТЧЁТ

Одной из целей работы является изучение процесса диффузии радикалов, индуцированной холодной плазменной струёй, в жидкость. Этот процесс чрезвычайно важен для эффективного применения холодных плазменных струй в медицине, так как далеко не все радикалы, генерирующиеся в процессе обработки биологической ткани, достигают клеток и влияют на их структуру. Перед этим им необходимо преодолеть жидкостный слой, покрывающий клетки, чья толщина может составлять от нескольких десятых мм до нескольких десятков мм. Поэтому, необходимо рассматривать задачу о диффузии различных радикалов сквозь жидкостный слой, для выявления основных зависимостей, влияющей на концентрацию радикалов.

Основным предположением о механизме влияния радикалов на живые клетки, которое рассматривается в данной работе, является появление осмотического давления из-за наличия избыточной концентрации радикалов в жидкости над клетками. Из-за повышенной концентрации радикалов в жидкости и полупроницаемости клеточной мембраны, вода «выкачивается» из клеток, нарушая внутриклеточные процессы и вызывая апоптоз. Из-за различной структуры мембран здоровых и раковых клеток, появляется возможность селективного уничтожения последних.

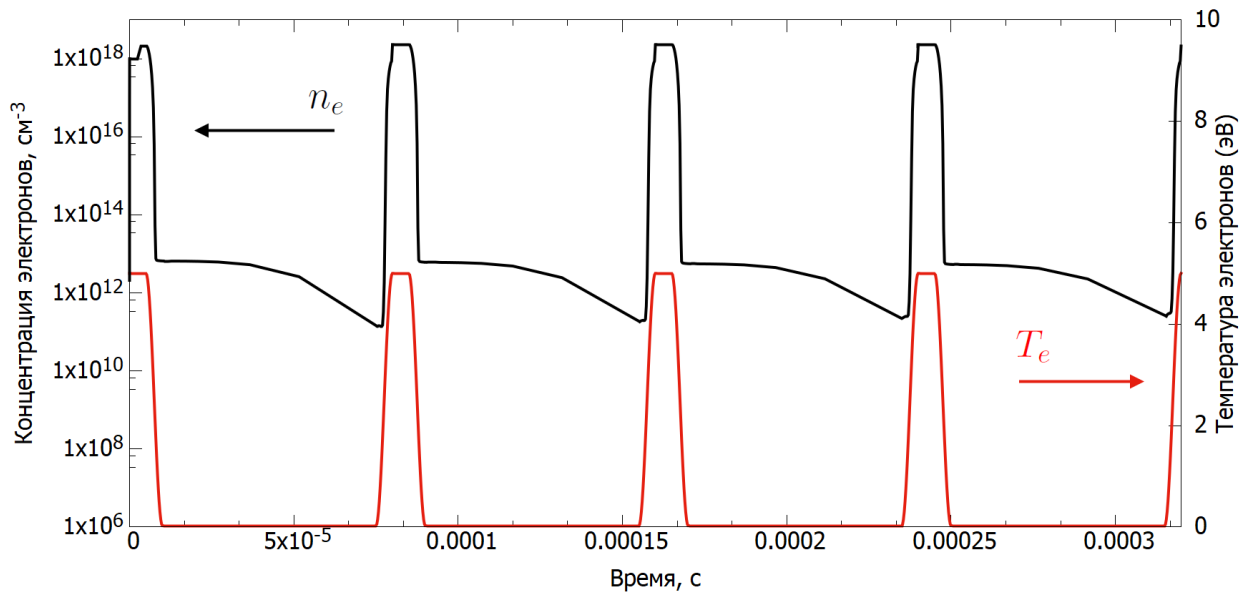
Для решения поставленной задачи, прежде всего, была необходима модификация плазмохимической численной модели, разработанной научным коллективом ранее. Кинетическая схема была расширена до 1493 химических реакций (ионизация, рекомбинация, возбуждение, гашение, прилипание и т.д.) и 98 компонент (ионы, метастабильные состояния, нейтральные атомы/молекулы, электроны). Для реакций с электронами (190 реакций) константы скорости брались либо из литературы, либо из решения уравнения Больцмана, хранились в виде функций электронной температуры и интерполировались на текущие её значения. Начальные условия определялись

из решения уравнения Навье-Стокса. Для учёта потери заряженных частиц на поверхности в правую часть системы уравнений химической кинетики были добавлены дополнительные потоковые члены. Таким образом, решаемые уравнения имеют вид:

$$\frac{\partial n_\alpha}{\partial t} = \sum_{\lambda=1}^{N_\alpha} (v_\lambda^R - v_\lambda^L) k_\lambda \prod_{l=1}^M n_l^{v_l^L} - \frac{\Gamma_\alpha}{d}$$

где  $n_\alpha$  – концентрация  $\alpha$ -ой компоненты,  $v_\lambda^R$  и  $v_\lambda^L$  – правые и левые стохастические коэффициенты  $\lambda$ -ой реакции,  $N_\alpha$  – полное число реакций, включающих  $\alpha$ -ую компоненту,  $k_\lambda$  – константа скорости  $\lambda$ -ой реакции,  $\Gamma_\alpha$  – поток  $\alpha$ -ой компоненты (он положительный для заряженных частиц, отрицательный для нейтральных частиц, образовавшихся после рекомбинации ионов со стенкой, и нулевой для остальных),  $d$  – оценочное значение толщины пограничного слоя ( $\sim 0.1$  мм). Для решения системы уравнений использовался кластер НГУ.

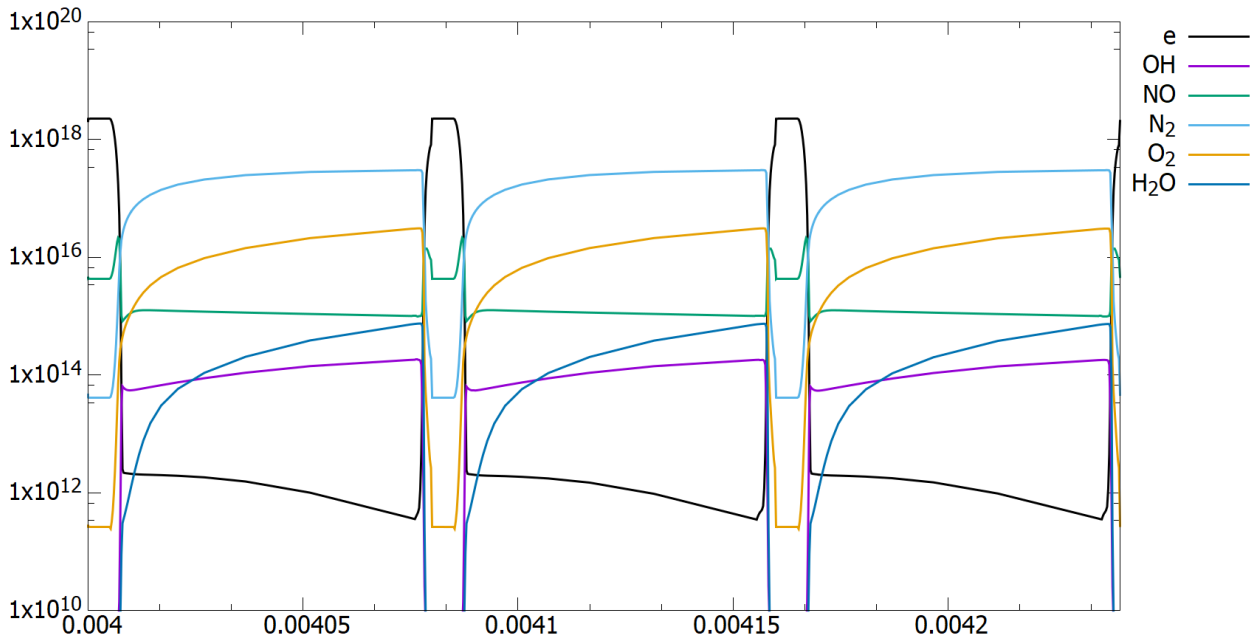
Для моделирования процесса прихода последовательности стримеров к поверхности, температура электронов задавалась в качестве периодической функции времени с формой импульса, определённой из двумерного расчёта. Температура электронов и расчётная эволюция концентрации плотности электронов изображена на рисунке 1.



*Рис. 1. Зависимость функции температуры электронов от времени и рассчитанная эволюция концентрации электронов*

В процессе расчёта были получены эволюции концентраций различных радикалов при включенном плазменном устройстве. Расчёт показывает, что во

время прихода стримера, у поверхности интенсивно протекают процессы ионизации и диссоциации. После того как температура электронов спадает до температуры газа, атомарные азот, кислород и водород и ионы объединяются, образуя молекулы воздуха и активные радикалы. Расчётные концентрации некоторых компонент изображены на рисунке 2.



*Рис. 2. Рассчитанные зависимости электронов и концентраций молекул воздуха и радикалов OH и NO для  $T_{e,max} = 5$  эВ*

Также в работе были получены эволюции концентраций различных компонент при выключенном плазменном устройстве, что позволяет разделить все радикалы на долгоживущие (рисунок 3) и короткоживущие (рисунок 4).

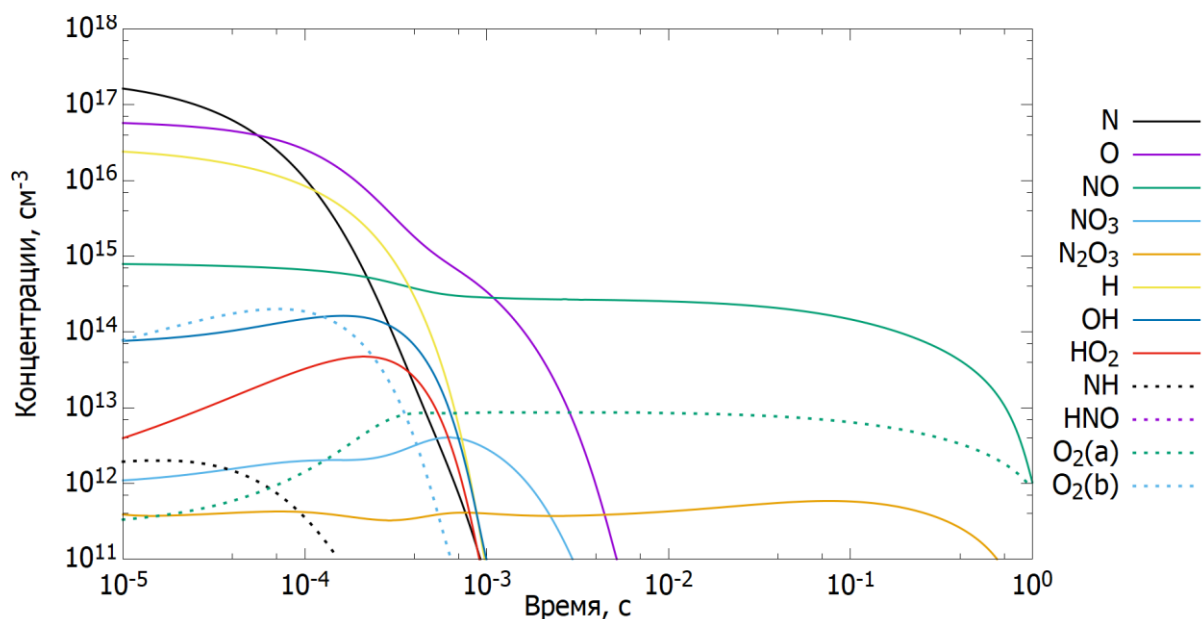


Рис. 3. Рассчитанные зависимости концентраций короткоживущих радикалов для  $T_{e,max} = 5$  эВ после выключения плазменного устройства после 80-го импульса

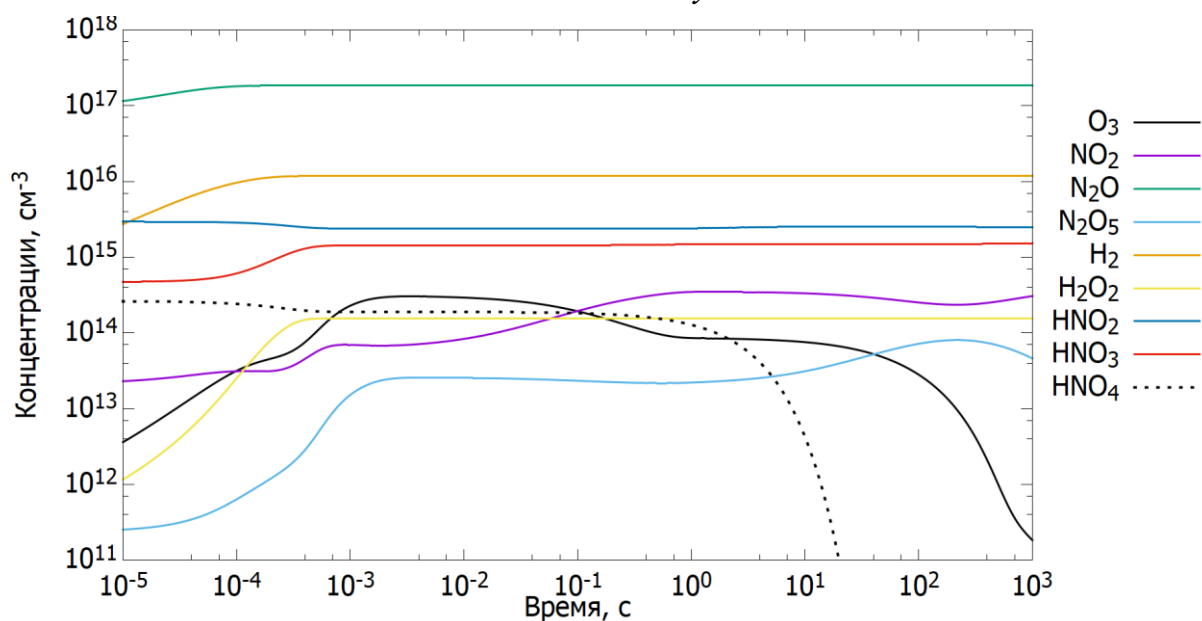


Рис. 10. Рассчитанные зависимости концентраций долгоживущих радикалов для  $T_{e,max} = 5$  эВ после выключения плазменного устройства после 80-го импульса

Результаты работы были доложены на конференции и опубликованы в научных журналах.

#### Список публикаций:

- 1) Increase of electric field on streamer/surfaces contact area with using external electrode, 2019, I V Schweigert, S Vagapov, L Lin and M Keidar, Journal of Physics: Conference Series

2) Numerical modelling of plasmachemistry induced by cold atmospheric plasma jet near surface, 2019, I V Schweigert, S Vagapov, L Lin and M Keidar, Journal of Physics: Conference Series

**Список докладов на конференциях:**

- 1) XVI Всероссийский семинар с международным участием «Динамика Многофазных Сред», 30 сентября – 5 октября 2019