Разработка самосогласованной столкновительно - излучательной модели диссоциации молекулы углекислого газа в низкотемпературной плазме атмосферного давления [[1]](#footnote-1)\*)

DOI: 10.34854/ICPAF.2021.48.1.121

Шахатов В.А.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Ордена Трудового Красного Знамени Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук, г. Москва, Россия, [shakhatov@ips.ac.ru](mailto:shakhatov@ips.ac.ru)

В настоящее время проявляется повышенный интерес к созданию плазмохимических реакторов, в которых для утилизации диоксида углерода СО2 используется низкотемпературная плазма различных газовых разрядов атмосферного давления (барьерный, микроволновой и высокочастотный разряды, тлеющий разряд постоянного тока и т.д.).

Важным этапом при создании и оптимизации работы плазмохимических реакторов является разработка самосогласованных столкновительно – излучательных (высокой размерности) моделей многокомпонентной низкотемпературной плазмы в чистом СО2 и в газовых смесях, содержащих СО2.

Данная работа посвящена разработке согласованных математической и физической моделей низкотемпературной плазмы в чистом СО2. Математическая модель включает: компонентный состав (модели химических соединений с соответствующими квантовыми состояниями), физико-химические процессы (с базами данных сечений, констант скоростей, коэффициентами переноса и т.д.), уравнения (электродинамики, процессов переноса излучения, компонент газовой среды и теплопроводности) и методы самосогласованного решения уравнений. Физическая модель многокомпонентной низкотемпературной плазмы основывается на предположениях, при которых справедливы уравнения и методы их решения. Основное внимание уделяется анализу малоизученных физико-химических процессов, обуславливающих диссоциацию углекислого газа в неравновесных условиях.

Установлено, что в низкотемпературной плазме атмосферного давления упругие столкновения и неупругие столкновения первого и второго рода между электронами и возбужденными молекулами СО2 обуславливают сложную зависимость релаксация энергии, запасенной в поступательных степенях свободы электронов:

от параметров газового разряда (напряженности электрического поля Е, концентрации плазмообразующего газа, давления и поступательной температуры газа), компонентного состава и концентраций тяжелых частиц в колебательно- и электронно- возбужденных состояниях;

от времени пребывания возбужденных частиц в газовом разряде и его послесвечении;

от полноты и степени детализации (по квантовым состояниям тяжелых частиц) кинетической схемы, описывающей упругие столкновения и неупругие соударения первого и второго рода электронов с тяжелыми частицами;

от абсолютных значений сечений, соответствующих упругим и неупругим соударениям электронов с тяжелыми частицами.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ИНХС РАН.

1. \*) [DOI – тезисы на английском](http://www.fpl.gpi.ru/Zvenigorod/XLVIII/Lt/en/EX-Shakhatov_e.docx) [↑](#footnote-ref-1)