
Моделирование диссоциации в промежутке с неподвижной ЖИДКОСТЬЮ

Пек Борис

Параметры модели

Модуль электростатики: $-\nabla \cdot d \varepsilon_0 \varepsilon_r \nabla V = d \rho$ (1)

$$\rho = F(z_1 c + z_2 c_2)$$

$d = 1$ толщина [м]
 $\varepsilon_0 = 1$ диэлектрическая проницаемость
 $\rho = (c - c_2) \cdot 1e5$ объемная плотность заряда [Кл/м³]

Постоянная Фарадея:
 $F = e N_a \approx 96485$ [Кл/моль]

Уравнение Нернста-Планка без электронейтральности для положительного заряда:

$$\delta_{ts} \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (-D \nabla c - z u_m F c \nabla V) = R - \mathbf{u} \cdot \nabla c$$
 (2)

c – концентрация [моль/м³]
 \mathbf{u} – вектор скорости [м/с]
 F – число Фарадея [Кл/моль]

$$R = W - \alpha \cdot c \cdot c^2 \quad \text{– полное уравнение источника}$$

$$W = W_0 \exp\left(\frac{2e^{3/2} E^{1/2}}{(\varepsilon \varepsilon_0)^{1/2} kT}\right) \quad W_0 = \frac{1}{2} \frac{\sigma^2}{\varepsilon \varepsilon_0} \frac{1}{eb}$$

Диссоциация

Рекомбинация

$\sigma = 1e-12$ проводимость жидкости [м³/Ом]
 $\varepsilon = 2$ диэлектрическая проницаемость
 $\varepsilon_0 = 8.85e-12$ диэлектрическая проницаемость вакуума
 $k = 1.38e-23$ коэффициент
 $T = 300$ температура жидкости [К]
 $b = 1e-8$ подвижность ионов [м²/В·с]

$\delta_{ts} = 1$ временной масштабирующий коэффициент
 $D = 1e-8$ коэффициент диффузии (изотропный) [м²/с]
 $R = W - \alpha \cdot c \cdot c^2$ скорость реакции [моль/(м³ с)]
 $u_m = b \cdot 1e-5$ подвижность [с·моль/кг]
 $z = 1$ заряд частиц (относительно заряда электрона)
 $u=0, v=0$ компоненты вектора \mathbf{u} [м/с]
 $V = V$ потенциал [В] (рассчитывается в первом уравнении)

Уравнение Нернста-Планка без электронейтральности для отрицательного заряда:

$$\delta_{ts} \frac{\partial c^2}{\partial t} + \nabla \cdot (-D \nabla c^2 - z u_m F c^2 \nabla V) = R - \mathbf{u} \cdot \nabla c \quad (3)$$

$\delta_{ts} = 1$	временной масштабирующий коэффициент
$D = 1e-8$	коэффициент диффузии (изотропный) [м ² /с]
$R = W - \alpha * c * c^2$	скорость реакции [моль/(м ³ с)]
$u_m = b * 1e-5$	подвижность [с моль/кг]
$z = -1$	заряд частиц (относительно заряда электрона)
$u=0, v=0$	компоненты вектора \mathbf{u} [м/с]
$V = V$	потенциал [В] (рассчитывается в первом уравнении)

Constants:

Global expressions:

$\sigma = 1e-12$	$W = W0 * \exp(2 * (e^{1.5}) * ((Vx^2 + Vy^2)^{0.25}) * (t > 0)) / (k * T * ((\epsilon * \epsilon0)^{0.5}))$
$\epsilon = 2$	
$\epsilon0 = 8.85e-12$	
$k = 1.38e-23$	
$T = 300$	
$b = 1e-8$	
$e = 1.6e-19$	
$W0 = 0.5 * (\sigma^2) * 1e-5 / (b * \epsilon * \epsilon0)$	
$\alpha = 1e16$	

Параметры решателя

Вывести в моменты времени:

[0,5e-5,1e-4,5e-4,1e-3,5e-3,1e-2,5e-2,0.1:0.1:3]

Относительное отклонение: 0.0001

Абсолютное отклонение: с 1e-19 с² 1e-19 V 0.001

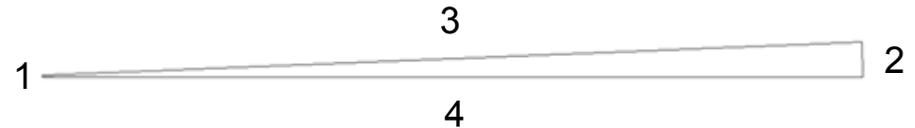
Размеры геометрии

$r_1 = 0.5 \text{ мм}$, $r_2 = 10 \text{ мм}$

Расчетная сетка

400 разбиений в радиальном направлении (ratio = 20) и одно – в угловом

Граничные условия



Система электродов цилиндр-цилиндр

Уравнение	Граница 1	Граница 2	Границы 3 и 4
(1)	$V_0 = 10e3$ (потенциал)	$V = 0$ (заземление)	$\mathbf{n} \cdot \mathbf{D} = 0$ (естественное ГУ)
(2)	$\mathbf{n} \cdot \mathbf{N} = 0$ (изоляция)	$N_0 = -\text{tflux_c_chekf}^*(t>0)$ (поток)	$\mathbf{n} \cdot \mathbf{N} = 0$ (изоляция)
(3)	$N_0 = -\text{tflux_c2_chekf2}^*(t>0)$ (поток)	$\mathbf{n} \cdot \mathbf{N} = 0$ (изоляция)	$\mathbf{n} \cdot \mathbf{N} = 0$ (изоляция)

Изоляция: $\mathbf{n} \cdot \mathbf{N} = 0$ $\mathbf{N} = -D\nabla c - zu_m Fc\nabla V + cu$

Поток: $-\mathbf{n} \cdot \mathbf{N} = N_0$ $\mathbf{N} = -D\nabla c - zu_m Fc\nabla V + cu$

mflux_c_chekf – электрофоретический поток, который рассчитывается решателем для c во всей области; tflux_c_chekf – полный поток, он состоит из трех слагаемых: электрофоретического, диффузионного и конвекционного.

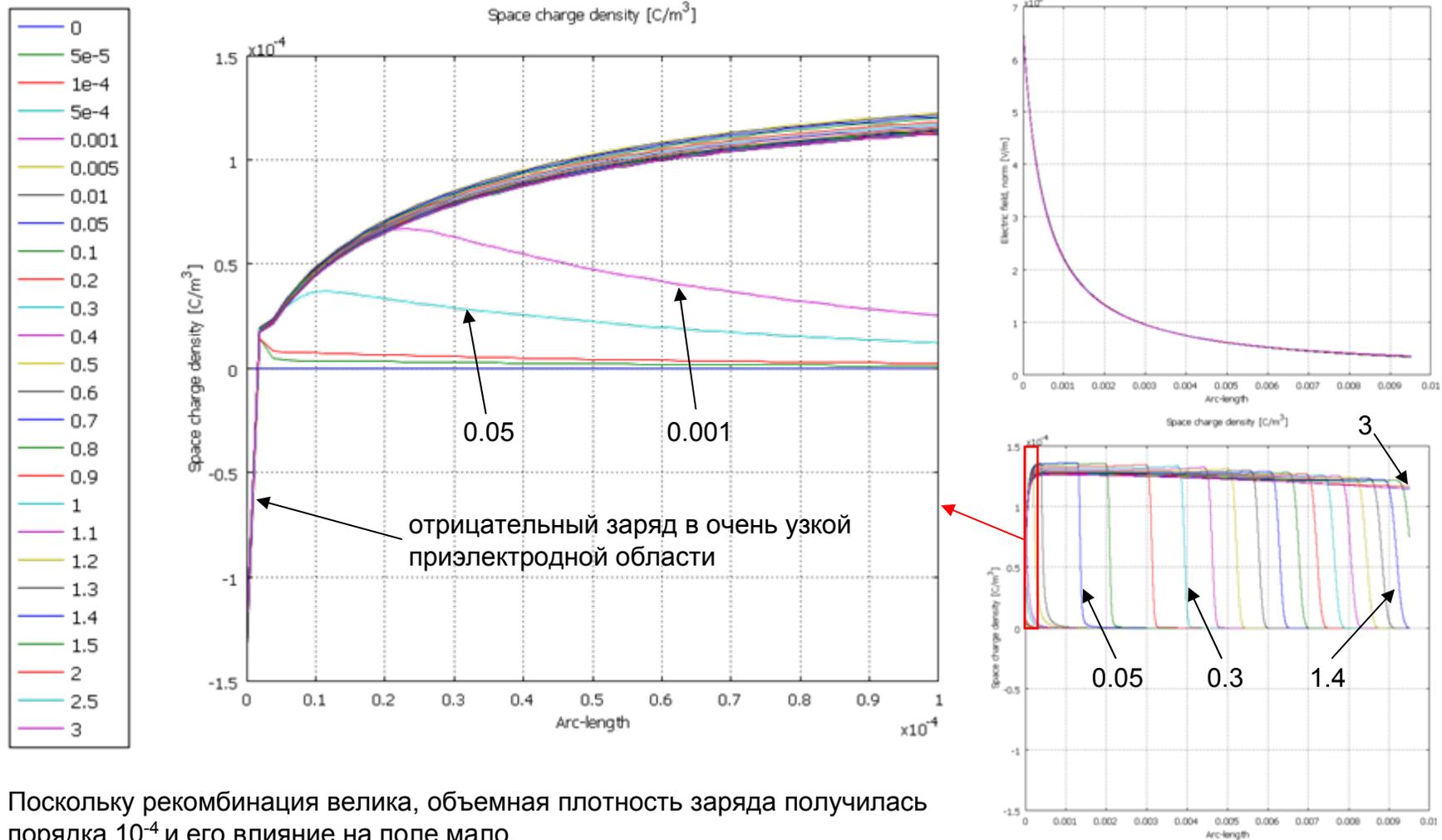
Т.е. в ГУ мы указываем, чтобы поток частиц проходил через границу беспрепятственно. Таким образом, избегаем проблем, которые возникают при использовании других ГУ:

- поток через границу = 0 => накопление заряда вблизи границы
- концентрация частиц = 0 (полная гибель) => большой градиент концентрации вблизи границы

Все результаты будут выведены на линейных графиках вдоль радиального пути (по оси X).

Электрическое поле и объемная плотность заряда

(модель с учетом рекомбинации: $\alpha = 1e16$)

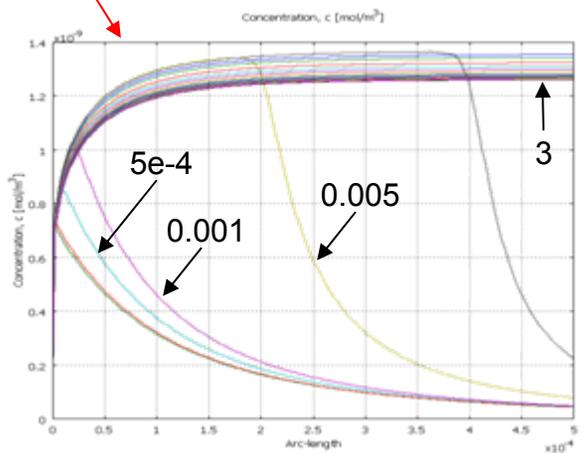
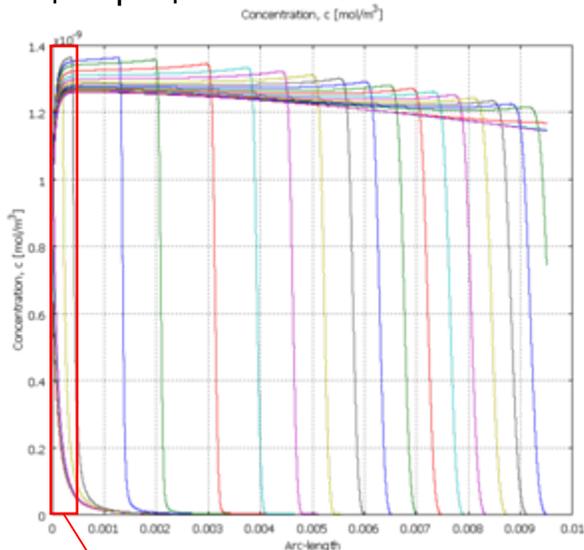


Поскольку рекомбинация велика, объемная плотность заряда получилась порядка 10^{-4} и его влияние на поле мало.

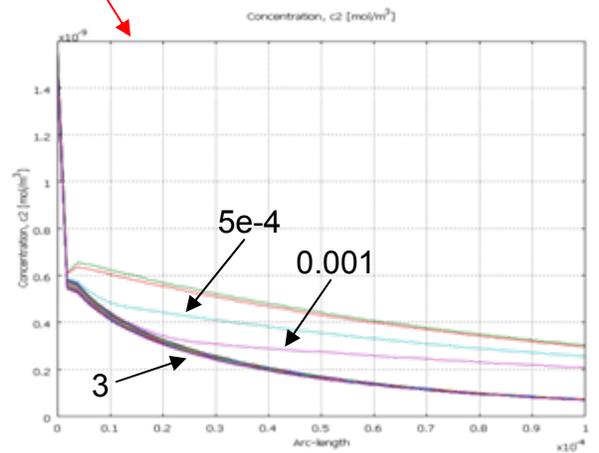
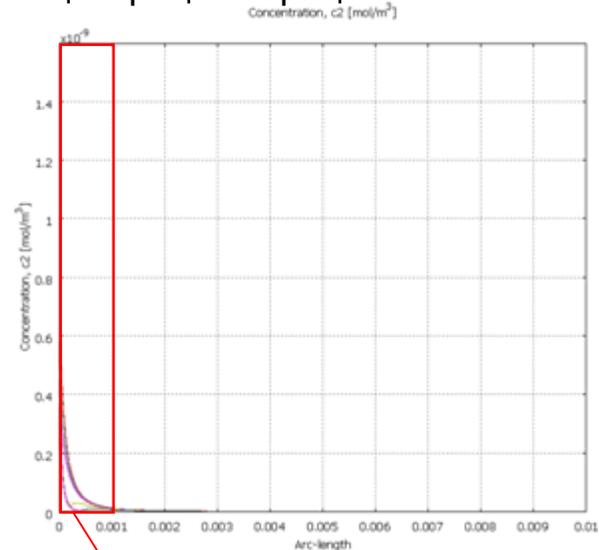
Концентрации ионов

(модель с учетом рекомбинации: $\alpha = 1e16$)

Концентрация положительных частиц

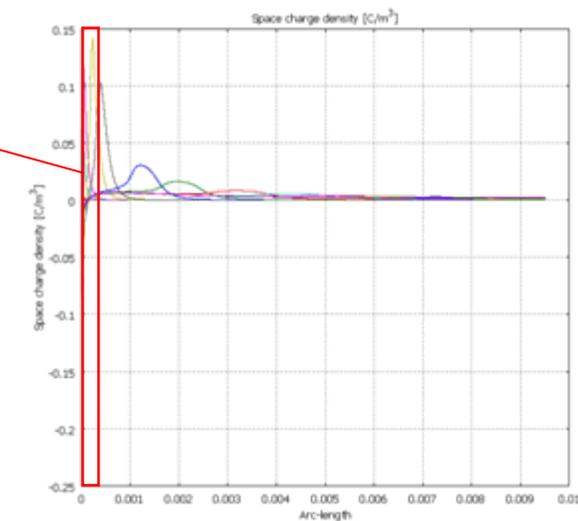
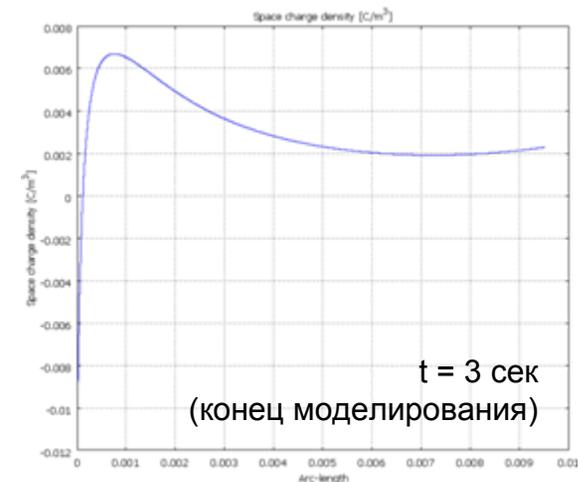
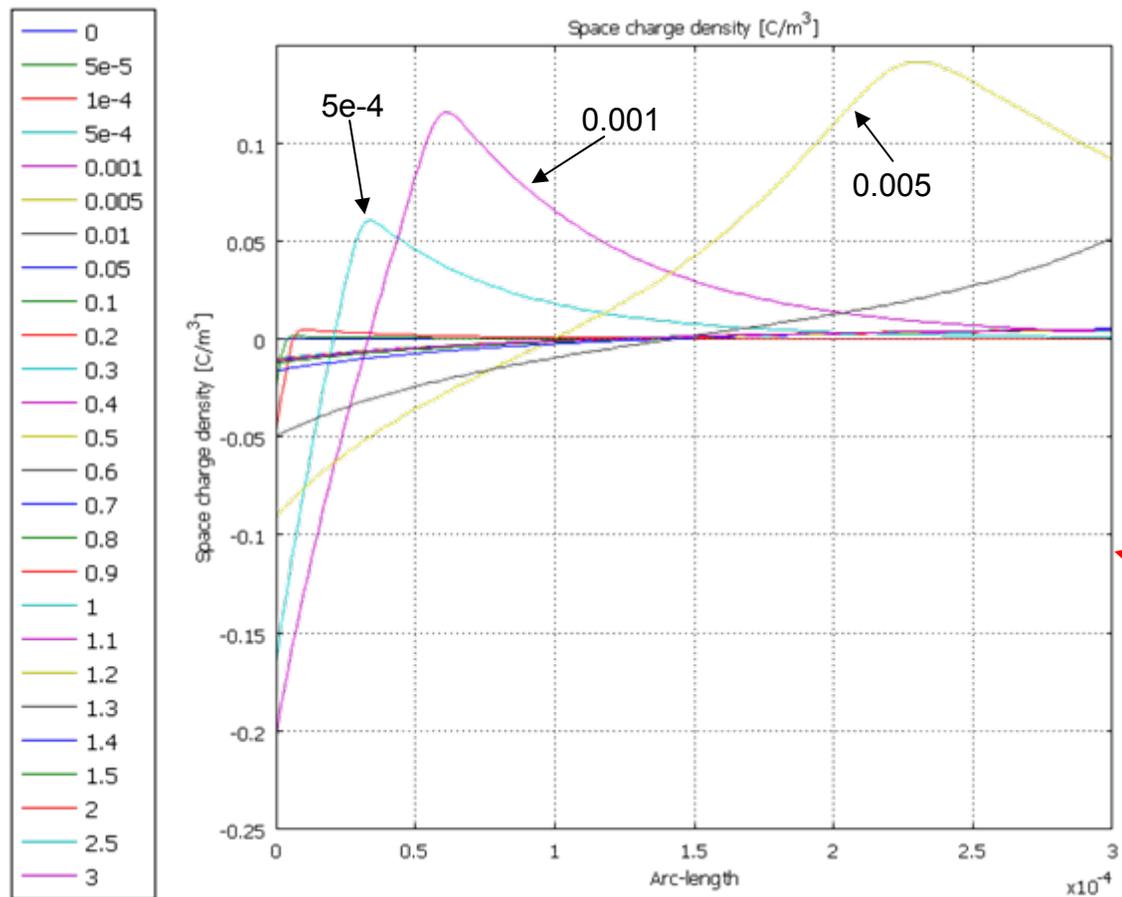


Концентрация отрицательных частиц



Объемная плотность заряда

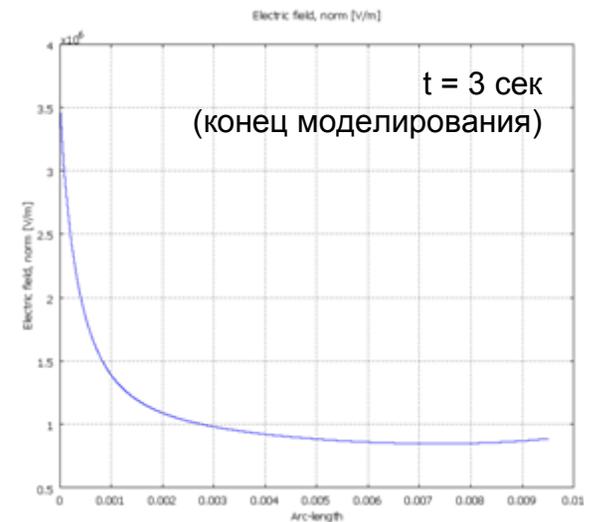
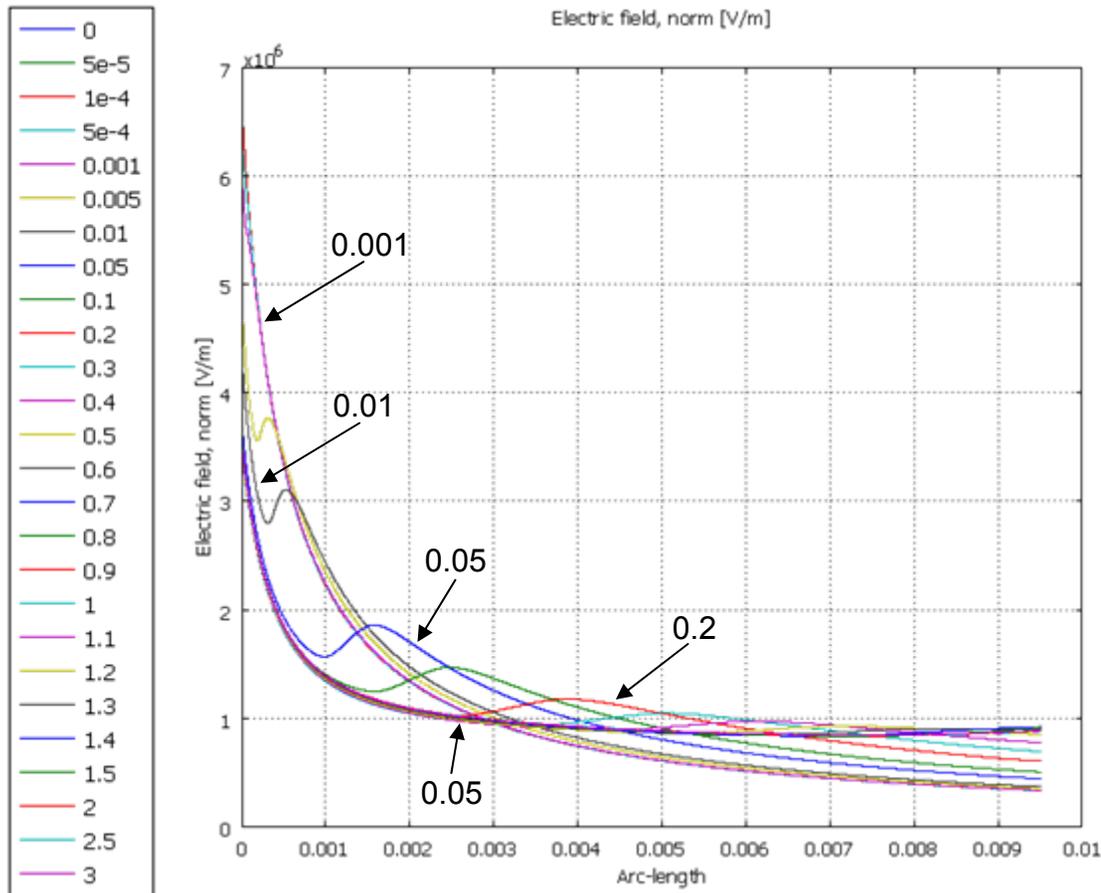
(модель с учетом рекомбинации: $\alpha = 1e8$)



Рекомбинация мала и рассчитанная плотность заряда велика, но с учетом малого пространственного масштаба, суммарный заряд получается в пределах разумного: $\sim 0.5 \cdot 0.2 \cdot 0.3e-4 = 3$ мкКл.

Электрическое поле

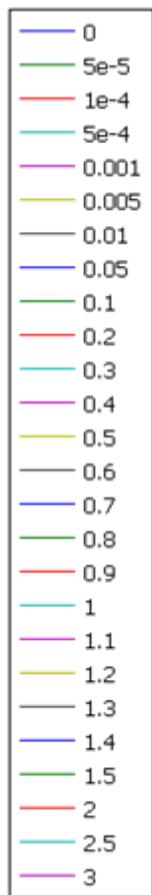
(модель с учетом рекомбинации: $\alpha = 1e8$)



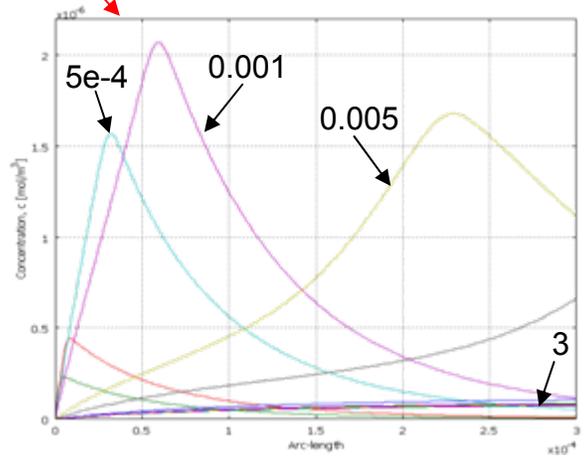
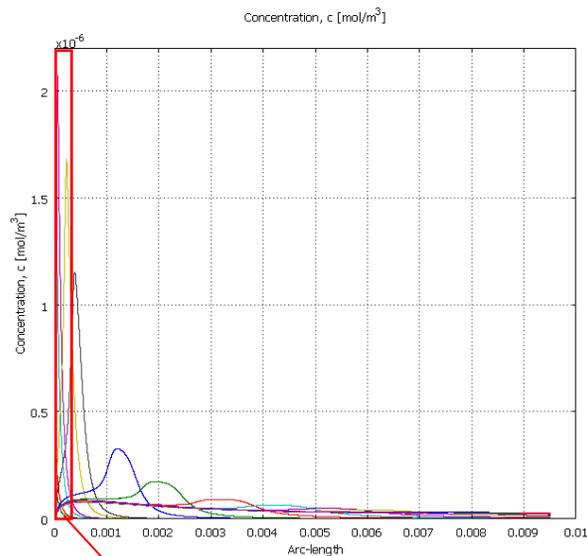
Рассчитанный заряд вносит существенное возмущение в электрическое поле.

Концентрации ионов

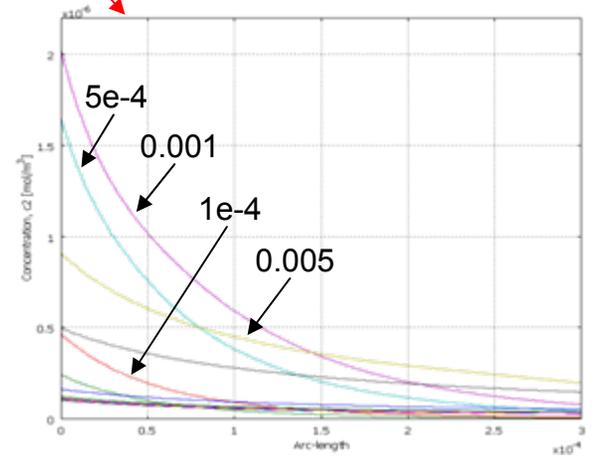
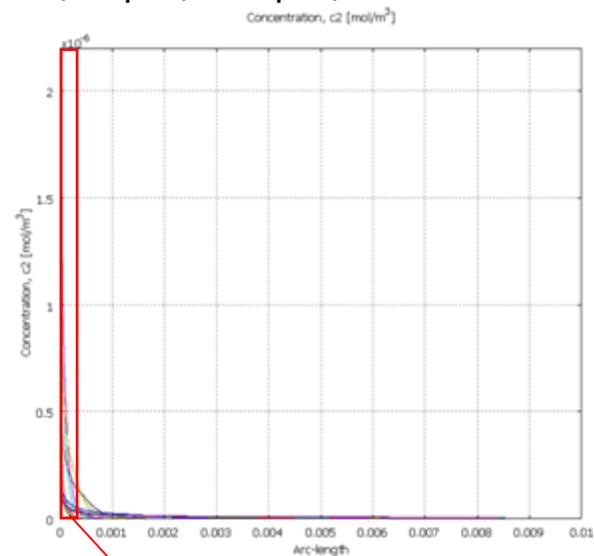
(модель с учетом рекомбинации: $\alpha = 1e8$)



Концентрация положительных частиц

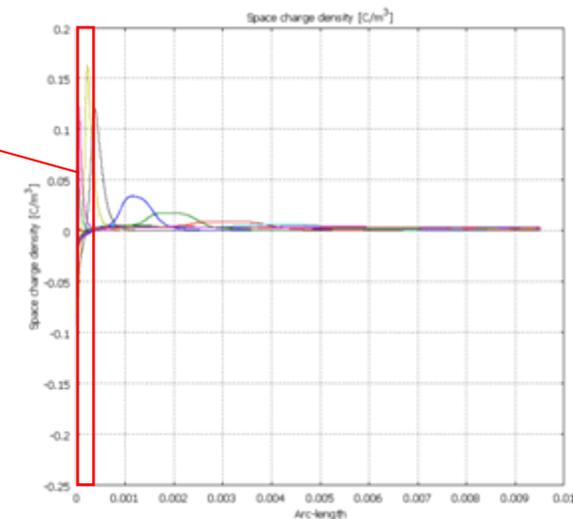
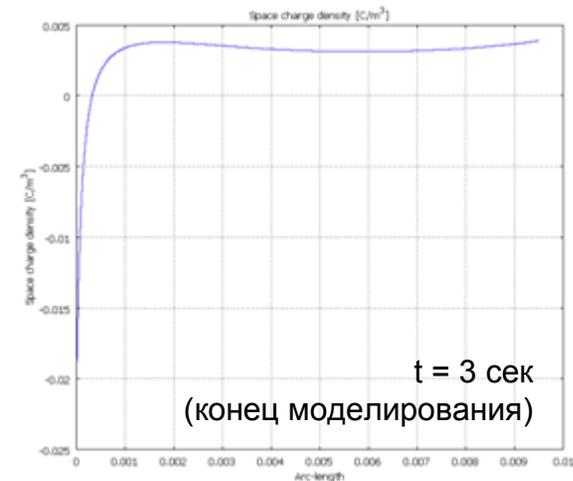
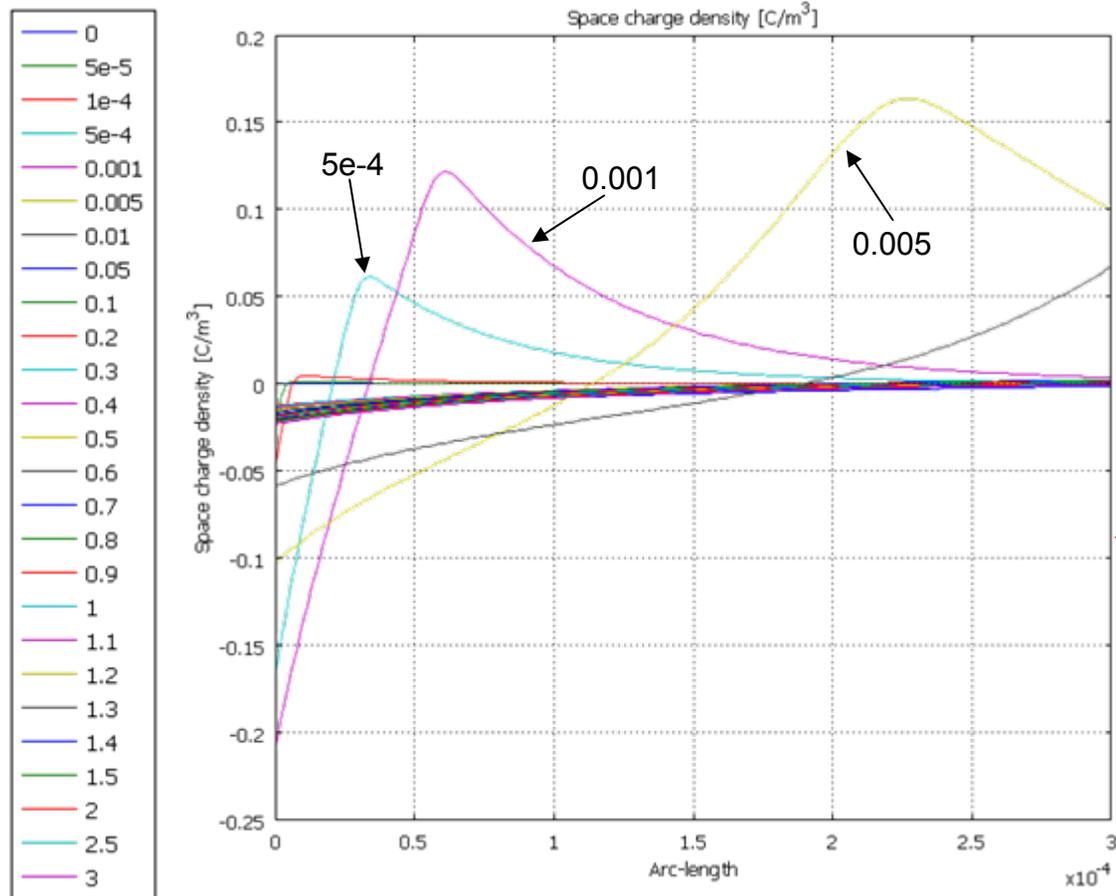


Концентрация отрицательных частиц



Объемная плотность заряда

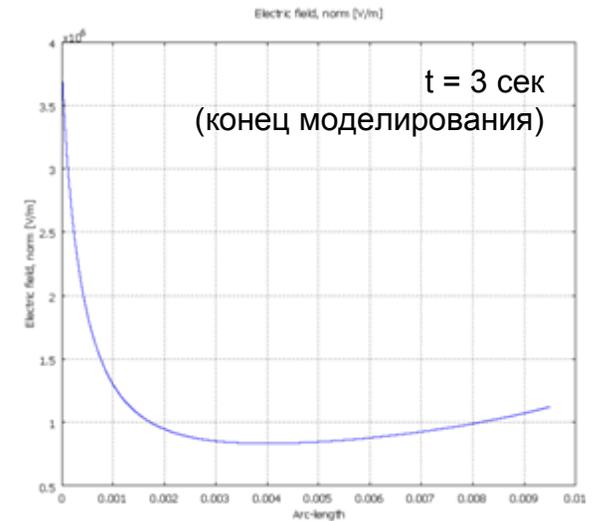
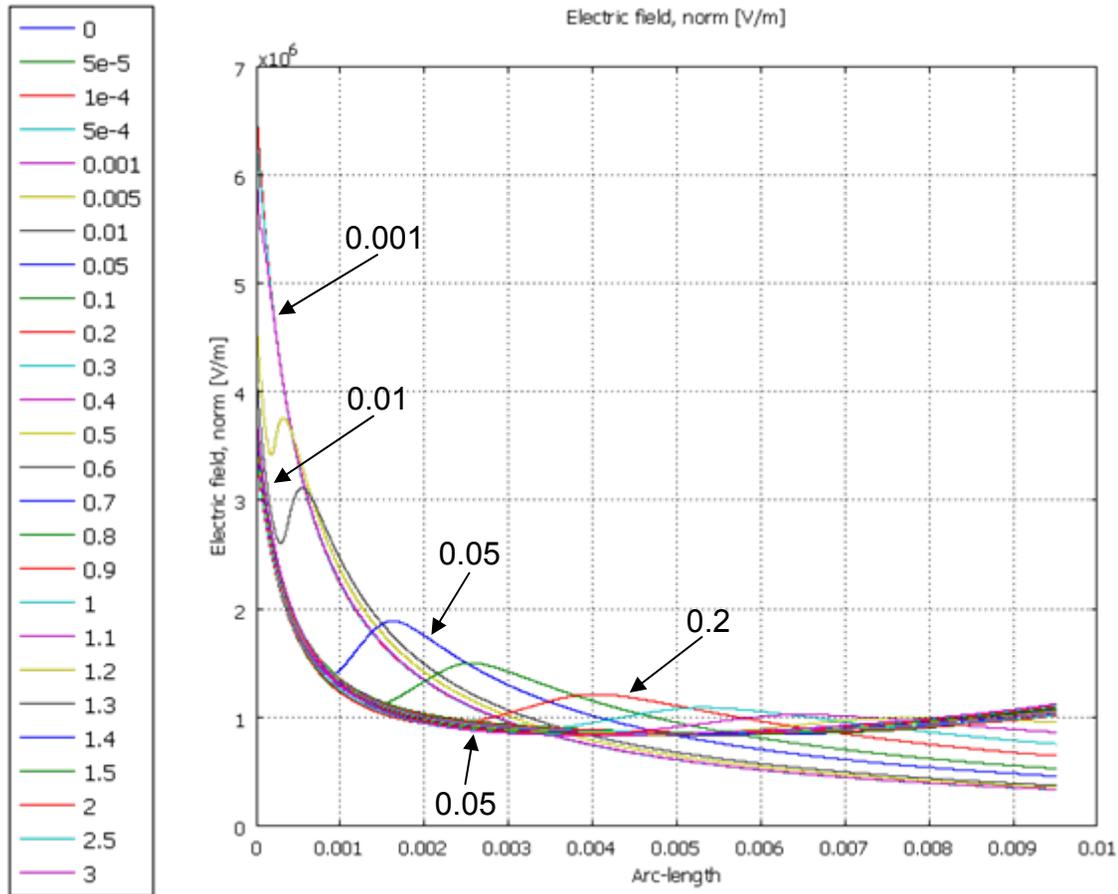
(модель без учета рекомбинации: $\alpha = 0$)



Рекомбинация отсутствует и единственным источником гибели заряда является поглощение на электродах. Рассчитанная плотность заряда вблизи анода велика, но с учетом малого пространственного масштаба, суммарный заряд получается в пределах разумного: $\sim 0.5 \cdot 0.2 \cdot 0.3e-4 = 3$ мкКл.

Электрическое поле

(модель без учета рекомбинации: $\alpha = 0$)

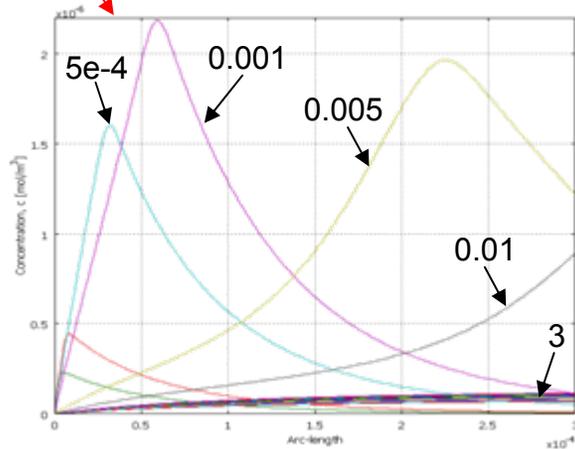
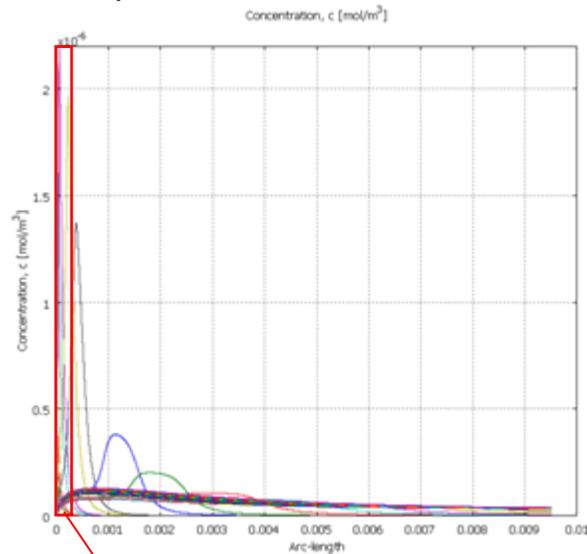


Рассчитанный заряд вносит существенное возмущение в электрическое поле.

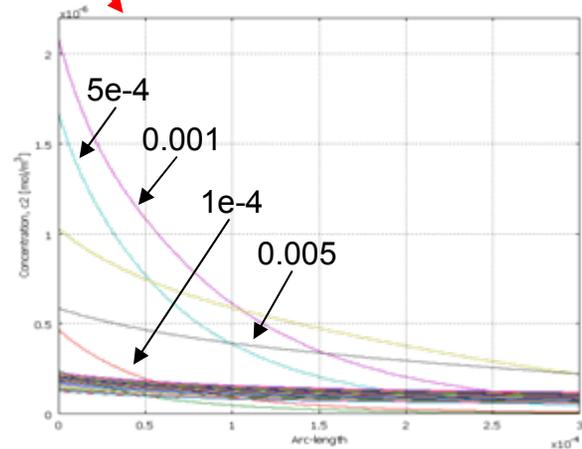
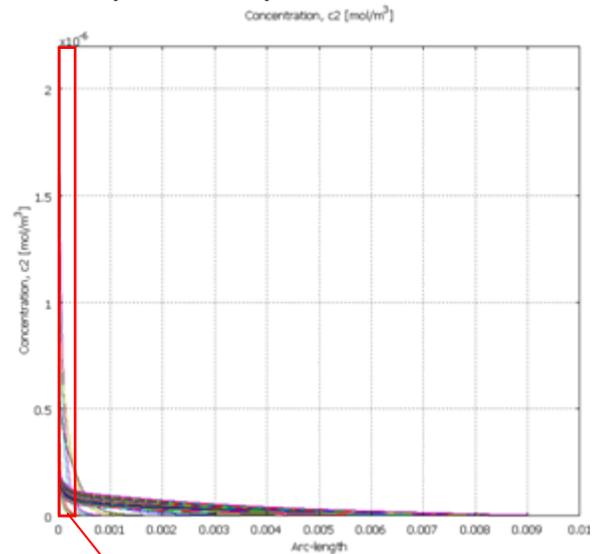
Концентрации ионов

(модель без учета рекомбинации: $\alpha = 0$)

Концентрация положительных частиц



Концентрация отрицательных частиц



Выводы

- Реакция рекомбинации имеет первостепенное значение для установления равновесия в подобной модели. Рекомбинация ограничивает рост частиц в области высокого поля.
- Поскольку все отрицательные частицы расположены в очень узкой приэлектродной области, а положительные занимают весь межэлектродный промежуток, то можно заменить такую систему эквивалентной, в которой радиус внутреннего электрода был бы немного больше и с него задавалась бы инжекция положительного заряда.
- При низких значениях рекомбинации решение задачи существенно зависит от граничных условий. Что очевидно, т.к. система стремится придти к равновесию, а источники гибели находятся только на электродах.