Document Type: Full length research Paper
Pages: 25-36

One-dimensional Simulation of Dielectric Barrier Discharge at Atmospheric Pressure in Nitrogen Gas with the Addition of 10% Oxygen

Azadeh Barjasteh*

Department of Physics, Faculty of Basic Science, Lorestan University, Khoram Abad, Iran

Received: 28.06.2025 Final revised: 30.06.2026 Accepted: 01.09.2026 Published On-Line: 05.09.2026

Doi: 10.22055/jrmbs.2026.20969

Abstract

Dielectric barrier discharges with a nitrogen-oxygen gas mixture are of great interest due to their positive effects on surface modification and sterilization. Among all the mixtures, the 90% nitrogen-10% oxygen gas mixture is of great importance due to its plasma stability and strong chemical activity. In this study, a one-dimensional fluid model is used to investigate the physicochemical characteristics of dielectric barrier discharge in a 90% nitrogen-10% oxygen gas mixture at atmospheric pressure. For this purpose, the COMSOL code is used to investigate the discharge characteristics, including the current-voltage curve and the generation and destruction of active particles under a sinusoidal voltage with an amplitude of 8 kV and a frequency of 10 kHz. The simulation shows that this combination does not turn into an arc or spark, or filament discharge while producing a relatively stable plasma. Also, the simulation results show that the most abundant ion in the discharge space is the +2 O ion, while only ten percent of the total gas is oxygen. Also, the most abundant active particles at this moment are oxygen atoms, NO molecules, and ozone molecules, respectively, which makes this gaseous mixture a suitable mixture for sterilization and surface modification processes.

Keywords: Dielectric Barrier Discharge, Nitrogen discharge simulation, discharge properties

* Corresponding Author: Barjasteh.a@lu.ac.ir

This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License

شبیه‌سازی یک بعدی تخلیه الکتریکی با مانع دی‌الکتریک در گاز نیتروژن فشار اتمسفری با اضافه کردن ٪۱۰ اکسیژن

آزاده برجسته *

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه لرستان، خرم آباد، ایران

دریافت: ۱٤۰٤/۰٤/۰۷ ویرایش نهائی: ۱٤۰۵/۰٤/۰۹ پذیرش: ۱٤۰۵/۰٦/۱۰ انتشار بر خط: ۱٤۰۵/۰٦/۱٤

Doi: 10.22055/jrmbs.2026.20969

چکیده

تخلیه‌های الکتریکی با سد دی‌الکتریک با ترکیب گازی نیتروژن–اکسیژن به‌خاطر اثرات مثبت در اصلاح سطوح و استریلیزاسیون به‌شدت مورد توجه هستند. در بین تمام ترکیبات، ترکیب گازی ٪۹۰ نیتروژن– ٪۱۰ اکسیژن به‌خاطر پایداری پلاسما و فعالیت شیمیایی شدید آن از اهمیت زیادی برخوردار است. در این مطالعه، یک مدل سیالی یک بعدی برای بررسی مشخصات فیزیکی–شیمیایی تخلیه الکتریکی با مانع دی‌الکتریک در ترکیب گازی ٪۹۰ نیتروژن–٪۱۰ اکسیژن با فشار اتمسفر استفاده می‌شود. برای این منظور از کد کامسول برای بررسی مشخصات تخلیه از جمله منحنی جریان–ولتاژ و تولید و نابودی ذرات فعال تحت یک ولتاژ سینوسی با دامنه ۸ کیلوولت و فرکانس ۱۰ کیلوهرتز استفاده می‌شود. شبیه‌سازی نشان می‌دهد که این ترکیب در عین حال که پلاسمای نسبتاً پایداری تولید می‌کند به قوس یا جرقه و یا تخلیه رشته‌ای تبدیل نمی‌شود. همچنین، این نتیجه از شبیه‌سازی به‌دست می‌آید که بیشترین یون در فضای تخلیه، یون O_4^+ است در حالی‌که تنها ده درصد از کل گاز را اکسیژن تشکیل می‌دهد. همچنین بیشترین ذرات فعال در این لحظه به‌ترتیب اتم‌های اکسیژن، مولکول‌های NO، و مولکول‌های اوزون هستند که این ترکیب گازی را ترکیبی مناسب جهت انجام فرآیندهای استریلیزاسیون و اصلاح سطح می‌کند.

کلیدواژگان: تخلیه الکتریکی با مانع دی‌الکتریک، شبیه‌سازی تخلیه نیتروژن، خواص تخلیه

مقدمه

امروزه تخلیه‌های الکتریکی با مانع دی‌الکتریکی[1] به‌خاطر کاربردهایی از قبیل کاربردهای پزشکی [۱]، کشاورزی [۲]، و بسته‌بندی مواد غذایی [۳] و ... بسیار مورد توجه هستند. تخلیه‌های الکتریکی با مانع دی‌الکتریک زمانی ایجاد می‌شوند که حداقل یک لایه دی‌الکتریک در فضای تخلیه بین دو الکترود، که یکی از آن‌ها متصل به یک ولتاژ نوسانی است، جای داده می‌شود. این لایه دی‌الکتریک از شکل‌گیری قوس یا جرقه جلوگیری کرده و سبب ایجاد یک پلاسمای سرد می‌شود. ولتاژ نوسانی نیز سبب می‌شود که الکترون‌ها انرژی کافی به‌دست آورند تا بتوانند اتم‌ها و مولکول‌های گاز را یونیزه کنند و پس از تجمع ذرات باردار روی دی‌الکتریک‌ها که میدان در خلاف جهت میدان اولیه برقرار می‌شود، جهت ولتاژ معکوس شده و تخلیه ادامه یابد. در فشار اتمسفر، به‌ویژه زمانی که

*نویسندهٔ مسئول: Barjasteh.a@lu.ac.ir

[1] Dielectric Barrier Discharge (DBD)

باز نشر این مقاله با ذکر منبع آزاد است.

این مقاله تحت مجوز کریتیو کامنز تخصیص ٤.۰ بین‌المللی می‌باشد

تخلیه‌های الکتریکی بدون پمپ خلأ ایجاد شوند و فرایند پیش پمپ قبل از تزریق گازهای اصلی انجام نشود، مقدار کمی اکسیژن در فضای تخلیه وجود دارد که می‌تواند ویژگی‌های تخلیه را تحت تأثیر قرار دهد [٤]. برای کاربرد موفق تخلیه‌های الکتریکی، و فهم بهتر برهم‌کنش‌های بین پلاسما و مواد، باید پارامترهای پلاسما به‌صورت تجربی یا شبیه‌سازی به‌دست آیند. این مسأله زمانی اهمیت می‌یابد که بخواهیم از پلاسما برای اصلاح سطوح یا استریلیزاسیون استفاده کنیم زیرا در مورد اصلاح سطوح، اتم‌های اکسیژن، ذرات فوق‌پایدار نیتروژن، و مولکول‌های NO نقش اساسی را بازی می‌کنند و سبب ایجاد واکنش‌های مختلف با سطح از جمله شکستن پیوندهای سطحی یا برانگیخته کردن سطح و تشکیل گروه‌های عاملی می‌شوند [٤]. این درحالی است که ذرات فعال اکسیژنی و نیتروژنی نقش اصلی را در فرآیندهای استریلیزاسیون بازی می‌کنند. مطالعات نشان می‌دهند که افزودن گاز اکسیژن به‌تخلیه الکتریکی در گازهای نجیب می‌تواند به‌خاطر افزایش حضور ذرات فعال اکسیژنی و نیتروژنی اثر ضدمیکروبی تخلیه‌های الکتریکی را افزایش دهد [٥,٦] . بنابراین بررسی تغییرات ذرات مختلف در پلاسما از جمله ذرات فوق پایدار و ذرات فعال اکسیژنی و نیتروژنی برای بهینه‌سازی فرآیندهای سطحی توسط پلاسما و اثرات ضد میکروبی از اهمیت خاصی برخوردار است. در میان ترکیبات مختلف گاز نیتروژن و اکسیژن، برای این مقاله ترکیب ٪۹۰ نیتروژن-٪۱۰ اکسیژن انتخاب می‌شود چون در این حالت مقدار اکسیژن آنقدر کم است که پلاسما پایدار مانده و آنقدر زیاد است که پلاسما به‌شدت حالت فعال دارد. در این مقاله با استفاده از نرم افزار کامسول، اثر حضور اکسیژن روی مشخصات تخلیه الکتریکی با مانع دی‌الکتریک از جمله چگالی الکترون‌ها، یون‌ها، ذرات فوق‌پایدار، و تابش‌های پلاسما بررسی می‌شود و این نتیجه به‌دست می‌آید که ترکیب گازی ٪۹۰ نیتروژن- ٪۱۰ اکسیژن می‌تواند ترکیب مناسبی برای فرآیندهای استریلیزاسیون باشد.

شبیه‌سازی

در این مطالعه، شبیه‌سازی یک بعدی تخلیه الکتریکی با مانع دی‌الکتریک در مخلوط گازی ٪۹۰ نیتروژن- ٪۱۰ اکسیژن در فشار اتمسفر انجام می‌شود تا پلاسما با یک ولتاژ سینوسی با دامنه ۸ کیلوولت و فرکانس ۱۰ کیلوهرتز ایجاد شود. در این شبیه‌سازی چگالی و انرژی میانگین الکترون با حل جفت معادلات سوق و پخش مطابق روابط زیر محاسبه می‌شوند.

$$\frac{\partial n_e}{\partial t}+\nabla.\vec{\Gamma}_e = R_e-(\vec{u}.\nabla)n_e \quad \text{.....۱}$$

$$\vec{\Gamma}_e = -(\vec{\mu}.\vec{E})n_e - D_e.\nabla n_e \quad \text{.....۲}$$

که در این روابط در این معادلات n_e چگالی الکترون؛ $\vec{\Gamma}_e$ شار الکترون؛ $\vec{u}$ سرعت میانگین گونه‌ها؛ R_e نرخ تولید الکترون، و D_e ضریب پخش الکترون است. نرخ انرژی ناشی از برخوردهای غیر الاستیک در معادلهٔ۳ و چگالی انرژی الکترون در معادلهٔ ٤ نشان داده شده است.

$$R_\varepsilon = S_{en}+(Q+Q_{gen})/q \quad \text{.....۳}$$

$$\frac{\partial n_\varepsilon}{\partial t}+\nabla.\vec{\Gamma}_\varepsilon+\vec{E}.\vec{\Gamma}_e = R_\varepsilon-(\vec{u}.\nabla)n_\varepsilon \quad \text{.....۴}$$

که در این روابط R_ε نرخ انرژی برخوردهای غیر الاستیک، Q_{gen} منبع اصلی گرما، و Q_ε چگالی انرژی الکترون است. برای گونه‌های یونی معادلهٔ پیوستگی به‌شکل معادلهٔ۵ حل می‌شود:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t}+\nabla.(n_i\vec{u}) = -\nabla.(\mu_i n_i q_i \nabla\varphi - D_i\nabla n_i)+S_i \quad \text{.۵}$$

که در این معادله نیز S_i منبع تولید یون، n_i چگالی یونی، و φ پتانسیل الکترواستاتیکی است. به‌عنوان شرایط مرزی، گسیل الکترون‌های ثانویه ناشی از برخورد یون‌ها و ذرات فوق پایدار در نظر گرفته

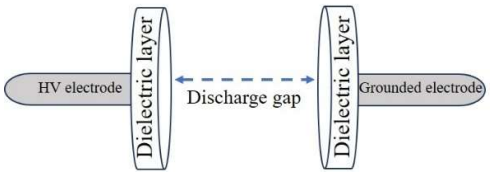
می‌شود. معادلات ٦ و ۷ به‌ترتیب شرایط مرزی تجمع بارسطحی دیواره‌ها و پایستگی بار در ناحیه دی‌الکتریک را نشان می‌دهد.

$$\frac{\partial \sigma_s}{\partial t} = n J_i + n J_e \quad \text{.....۶}$$

$$D = \varepsilon_0 \varepsilon_r E \quad \text{.....۷}$$

در معادلهٔ٦ پارامترهای σ_s، n ؛ J_i و J_e به‌ترتیب بار سطحی، بردار واحد نرمال به‌سطح، شار بار یونی، و شار بارالکترونی که به‌سطح برخورد می‌کند را نشان می‌دهد. همچنین در معادله ۷ پارامترهای D، ε_0 ؛ ε_r، و E به‌ترتیب جابه‌جایی الکتریکی، گذردهی الکتریکی خلأ، گذردهی الکتریکی نسبی، و میدان الکتریکی را نشان می‌دهد.

هندسه این تخلیه که در شکل۱ نشان داده شده است شامل دو الکترود دایره‌ای شکل به‌مساحت ۰٫۰۱ مترمربع است که روی هرکدام از آن‌ها یک دی‌الکتریک از جنس Al_2O_3 به‌ضخامت ۰٫۵ میلی‌متر و ثابت دی‌الکتریکی ۸ قرار داده شده است که به‌اندازهٔ ۱ میلی‌متر از هم جدا شده‌اند. مجموعه ذرات در نظر گرفته شده برای این شبیه سازی شامل الکترون‌ها، N_2^+، N_2B، N_2a، N_2A، NO^+، O^+، O_2^-، O_2^+، N_4^+، N_3^+، N_2C، ND، N، O_3، O و NO می‌باشد که در میان آن‌ها ذرات N_2A و N_2a، ذرات فوق‌پایدار و N_2B و N_2C ذرات تابشی نیتروژن هستند.



شکل۱. هندسه در نظر گرفته شده جهت شبیه‌سازی

همچنین مقادیر اولیه $10^{13}/m^3$ برای چگالی الکترون‌ها، $5\times10^{13}/m^3$ برای چگالی یون‌های N_4^+، $2\times10^{11}/m^3$ برای چگالی یون‌های N_3^+، $1\times10^{11}/m^3$ برای چگالی یون‌های O_2^+، O_2^-، و O^+، و $1\times10^{10}/m^3$ برای یون‌های NO^+ در نظر گرفته می‌شود. در این شبیه‌سازی فشار گاز ۱ اتمسفر و دمای آن ۳۰۰ درجه کلوین در نظر گرفته می‌شود. همچنین برای انجام شبیه‌سازی جمعاً ۳٦ واکنش در نظر گرفته شده است که مجموعه این واکنش‌ها به‌همراه نرخ آن‌ها در جدول۱ نشان داده شده است. برای واکنش‌های الکترونی از سطح مقطع واکنش استفاده می‌شود که از سایت Lxcat.net به‌دست می‌آید. این شبیه سازی بر اساس مجموعه روابطی است که در مرجع [۷] به‌طور کامل بیان شده‌اند.

جدول۱. مجموعهٔ واکنش‌های در نظر گرفته شده برای شبیه‌سازی به‌همراه نرخ آن‌ها.

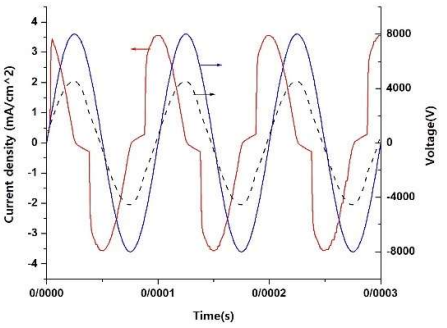
شماره واکنش	واکنش	نرخ واکنش (cm^3/s)
R_1	$e+N_2=>N_2^++2e$	*f(E/N)*
R_2	$e+N_2=>e+N_2A$	*f(E/N)*
R_3	$e+N_2=>e+N_2a$	*f(E/N)*
R_4	$e+N_2=>e+N_2B$	*f(E/N)*
R_5	$e+N_2=>N_2C+e$	*f(E/N)*
R_6	$e+N_2^+=>2N$	$2.8\times10^{-7}(T_g/T_e)^{0.5}$
R_7	$N_2^++N_2A=>N_3^++N_2$	3×10^{-10}
R_8	$N_4^++N_2=>N_2^++2N_2$	3.4×10^{-15}
R_9	$N_4^++e=>N_2C+N_2$	$2\times10^{-6}(T_g/T_e)^{0.5}$
R_{10}	$N_2+N_2a=>N_2+N_2$	2×10^{-13}
R_{11}	$N_2+N_2a=>N_2B+N_2$	2×10^{-13}
R_{12}	$N_2a+N_2a=>N_4^++e$	1×10^{-11}
R_{13}	$N_2a+N_2A=>N_4^++e$	1.5×10^{-11}
R_{14}	$N_2A+N_2A=>N_2C+N_2$	3×10^{-10}
R_{15}	$N_2A+N_2A=>N_2B+N_2$	7.7×10^{-11}
R_{16}	$N_2C=>N_2B+hv$	2.7×10^{7}
R_{17}	$N_2C+N_2=>N_2a+N_2$	1×10^{-11}
R_{18}	$N_2B=>N_2A+hv$	1.5×10^{5}
R_{19}	$N_2B+N_2=>N_2+N_2A$	5×10^{-11}

$R_{۲۰}$	$e+O_۲=>O_۲^{+}+۲e$	*f(E/N)*
$R_{۲۱}$	$e+O_۲=>O_۲^{-}$	*f(E/N)*
$R_{۲۲}$	$e+O_۲^{+}=>۲O$	$٤/٨\times١٠^{-٧}$
$R_{۲۳}$	$O_۲^{-}+O=>O_۲+e$	$١/٥\times١٠^{-١٠}$
$R_{۲٤}$	$O+O_۲=>O_۲+O_۲$	$٨/٣\times١٠^{-١٥}$
$R_{۲٥}$	$N_۲^{+}+O_۲=>N_۲+O_۲^{+}+O$	١×١٠^{-١٠}
$R_{۲٦}$	$N_۲^{+}+O_۲=>N_۲+O_۲^{+}$	$٦\times١٠^{-١١}(T_g/T_e)^{٠/٥}$
$R_{۲۷}$	$N_٤^{+}+O_۲=>۲N_۲+O_۲^{+}$	$٢/٥\times١٠^{-١٠}$
$R_{۲۸}$	$N_۲^{+}+O=>NO^{+}+N$	$١/٣\times١٠^{-١٠}(T_g/T_e)^{٠/٥}$
$R_{۲۹}$	$N_٤^{+}+O=>O^{+}+۲N_۲$	$٢/\times١٠^{-١٠}$
$R_{۳٠}$	$N_۲A+O_۲=>O+O+N_۲$	$٢/٥\times١٠^{-١٢}$
$R_{۳١}$	$N_۲A+O=>N+NO$	٧×١٠^{-١٢}
$R_{۳۲}$	$N_۲A+NO=>NO+N_۲$	٧×١٠^{-١١}
$R_{۳۳}$	$N_۲a+O_۲=>O+O+N_۲$	$٢/٨\times١٠^{-١١}$
$R_{۳٤}$	$N_۲a+NO=>N+O+N_۲$	$٣/٦\times١٠^{-١٠}$
$R_{۳٥}$	$N_۲B+O_۲=>O+O+N_۲$	٣×١٠^{-١٠}
$R_{۳٦}$	$N_۲C+O_۲=>O+O+N_۲$	٣×١٠^{-١٠}

همچنین برای معادلات الکترونی شرایط مرزی باید روی مرز دی‌الکتریک‌ها در نظر گرفته شود که این فرآیند با وارد کردن انتشار ثانویه الکترون‌ها ناشی از برخورد یون‌ها و ذرات فوق‌پایدار در نظر گرفته می‌شود. ضریب انتشار ثانویه در نظر گرفته شده برای این شبیه‌سازی برای یون‌ها و ذرات فوق پایدار نیتروژن ۰/۰۱ است.

نتایج

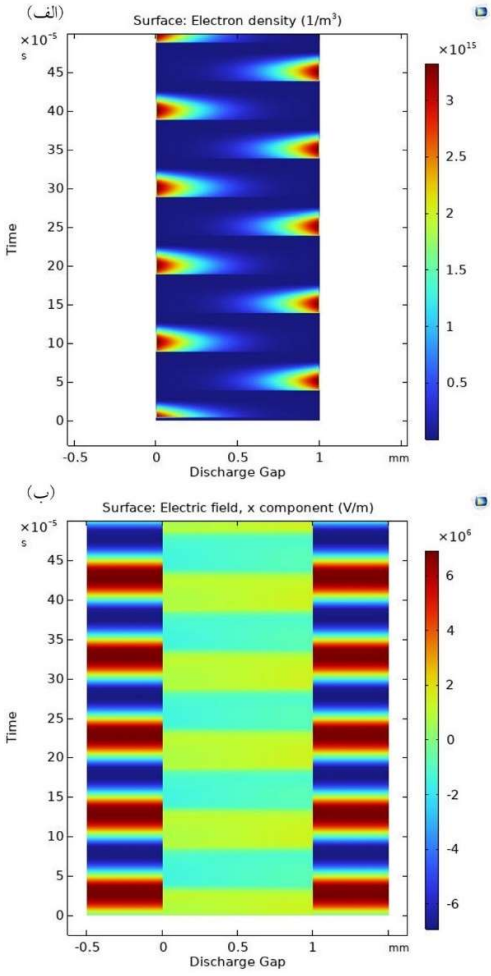
شکل۲ منحنی جریان–ولتاژ را برای تخلیه الکتریکی با مانع دی‌الکتریک در ترکیب ٪۹۰ نیتروژن– ٪۱۰ اکسیژن نشان می‌دهد. همان‌طوری که مشاهده می‌شود برای این ترکیب گازی همچنان تخلیه در حالت یکنواخت است چرا که هنوز مقدار اکسیژن آنقدری زیاد نیست که بتواند تخلیه را از حالت یکنواخت خارج کرده و آن را به‌سمت تخلیه رشته‌ای یا جرقه سوق دهد. در واقع ترکیب ٪۹۰ نیتروژن–٪۱۰ اکسیژن یک نقطه بهینه ایجاد می‌کند که در آن پلاسما پایدار می‌ماند اما در عین حال بسیار فعال است.



شکل۲. منحنی جریان–ولتاژ برای تخلیه با ترکیب ٪۹۰ نیتروژن– ٪۱۰ اکسیژن.

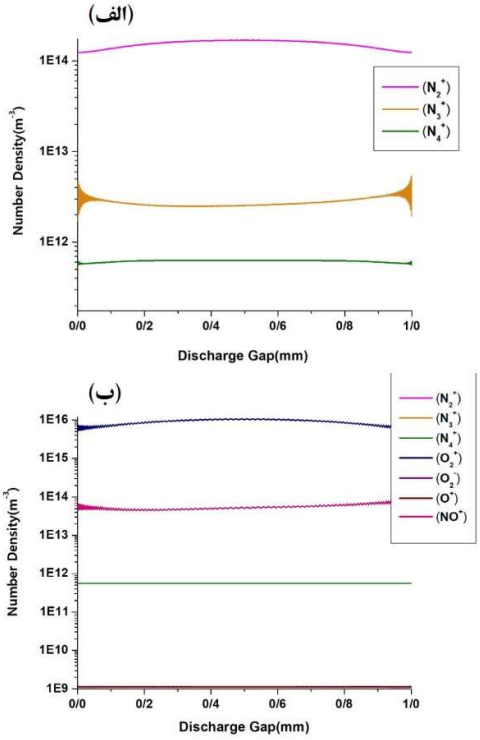
شکل۳الف تغییرات چگالی الکترون‌ها و شکل۳ب تغییرات میدان الکتریکی را در فضای تخلیه و دی‌الکتریک‌ها نشان می‌دهد. همان‌طوری که در این شکل مشاهده می‌شود، در هر چرخه، الکترون‌هایی که در اثر فرآیندهای یونیزاسیون در فضای تخلیه تولید می‌شوند روی یک دی‌الکتریک جمع می‌شوند. این در حالی است که یون‌های مثبت روی دی‌الکتریک مقابل متمرکز می‌شوند تا با ایجاد یک میدان الکتریکی ثانویه، میدان درون فضای تخلیه را به‌شدت کاهش دهند. بنابراین میدان الکتریکی در فضای تخلیه کاهش می‌یابد. از طرفی مطابق با شکل۳الف بهمن الکترونی برای ایجاد تخلیه الکتریکی از میانه فضای تخلیه به‌سمت دی‌الکتریک‌ها شروع می‌شود. شکل٤ نمودار لگاریتمی جذر میانگین مربعی یون‌های مختلف را در الف: تخلیه نیتروژنی خالص و ب: تخلیه با ترکیب ٪۹۰ نیتروژن– ٪۱۰ اکسیژن برحسب فضای تخلیه نشان می‌دهد. همان‌طوری که در این شکل‌ها مشاهده می‌شود، در تخلیه ٪۹۰ نیتروژن– ٪۱۰ اکسیژن، ذرات $O_۲^{+}$ بیشترین تعداد یون‌ها را طول فرآیند تخلیه دارند– در حالی‌که تنها ٪۱۰ از کل گاز را اکسیژن تشکیل می‌دهد. این

نتیجه بیان می‌کند که با وجود درصد خیلی کم اکسیژن، مقدار آن در تخلیه غالب می‌شود چون انرژی یونیزاسیون مولکول‌های اکسیژن از مرتبه ۱۲٫۰۷ الکترون ولت است درحالی‌که انرژی یونیزاسیون مولکول‌های نیتروژن از مرتبه ۱۵٫۵۸ الکترون‌ولت است. بنابراین با صرف انرژی کمتری مولکول‌های اکسیژن می‌توانند یونیزه شوند. بدین ترتیب تعداد آن‌ها در ضمن فرآیند تخلیه غالب می‌شود.



شکل۳. الف: تغییرات چگالی الکترون‌ها و ب: تغییرات میدان الکتریکی در فضای تخلیه.

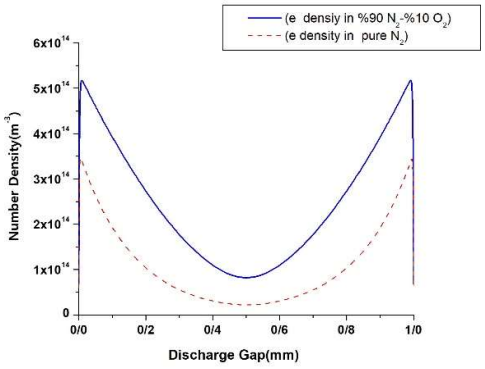
در تخلیه نیتروژنی خالص، یون‌های N_4^+ کمترین تعداد را دارند در حالی‌که در تخلیه ٪۹۰ نیتروژن–٪۱۰ یون‌های اکسیژن O^+ کمترین تعداد را به‌خود اختصاص می‌دهند.



شکل٤. نمودار لگاریتمی جذر میانگین مربعی چگالی یون‌ها برحسب فاصله در الف: تخلیه نیتروژنی خالص و ب: تخلیه ٪۹۰ نیتروژن– ٪۱۰ اکسیژن

بنابراین در عمل اکسیژن سریعتر وارد واکنش‌های شیمیایی می‌شود. همچنین، در بسیاری از واکنش‌ها از جمله $e+O_2^+ \Rightarrow O+O$، $N_2A+O_2 \Rightarrow O+O+N_2$، $N_2a+O_2 \Rightarrow O+O+N_2$، $N_2a+NO \Rightarrow N+O+N_2$، $N_2B+O_2 \Rightarrow O+O+N_2$، $N_2C+O_2 \Rightarrow O+O+N_2$ رادیکال‌های اکسیژن تولید می‌شوند که به‌شدت فعال هستند. این ذرات از طریق واکنش $N_2^+ + O \Rightarrow NO^+ + N$ موجبات تولید یون‌های NO^+ را فراهم می‌کنند. بدین‌ترتیب در تخلیه ٪۹۰ نیتروژن– ٪۱۰ اکسیژن، چگالی این یون‌ها نیز غالب می‌شود. شکل۵ نیز جذر میانگین مربعی چگالی الکترون‌ها در تخلیه با گاز نیتروژن خالص (خط چین) و تخلیه با ترکیب گازی

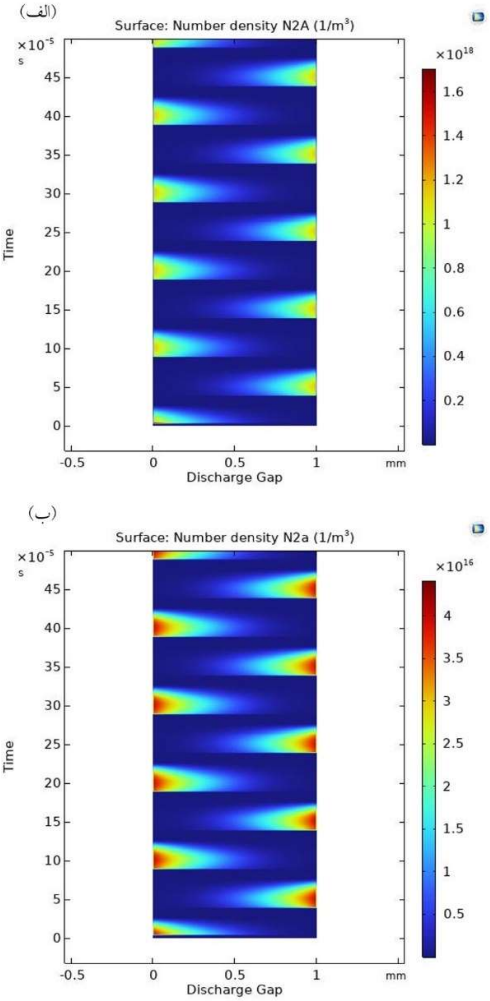
٪۹۰ نیتروژن- ٪۱۰ اکسیژن را نشان می‌دهد. همان‌طوری که در این شکل مشاهده می‌شود چگالی الکترون‌ها با افزودن ٪۱۰ اکسیژن به‌مقدار جزئی افزایش می‌یابد. این نتیجه برای مقادیر کم اکسیژن در مرجع [۸] نیز تأیید شده است. این پدیده به‌این خاطر است که در مقادیر کمِ اکسیژن، تعداد اتم‌های اکسیژن برای جذب الکترون‌ها از طریق الکترونگاتیوی کافی نیست. همچنین با توجه به کمتر بودن انرژی یونیزاسیون مولکول‌های اکسیژن (۱۲٫۰۷eV) در مقایسه با مولکول‌های نیتروژن (۱۵٫۵۸eV) افزودن مقدار کمی اکسیژن می‌تواند به تولید الکترون‌های بیشتر از طریق یونیزاسیون بیشتر مولکول‌های اکسیژن کمک کند.



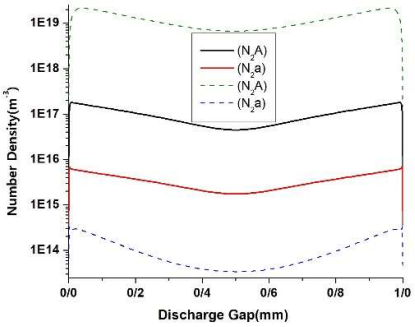
شکل۵. مقایسه جذر میانگین مربعی چگالی الکترون‌ها در تخلیه نیتروژنی خالص(خط چین) و تخلیه ٪۹۰ نیتروژن - ٪۱۰ اکسیژن (خط کامل).

شکل٦ تحولات فضا-زمانی ذرات فوق پایدار در فضای تخلیه را نشان می‌دهد. همان‌طوری که در این شکل مشاهده می‌شود چگالی هر دونوع ذره فوق پایدار نیتروژنی N_2A و N_2a روی دی‌الکتریک‌ها به‌حداکثر مقدار خود می‌رسد. این در حالی است که کسر مولی اولیه برای این ذرات بسیار کم و از مرتبه $1e^{-11}$ در نظر گرفته شده است. این ذرات نقش بسیار مهمی را در تولید الکترون‌ها و یون‌های N_4^+ از طریق یونیزاسیون پنینگ مطابق واکنش‌های R_{12} و R_{13} بازی می‌کنند. حضور حداکثری آن‌ها روی دی‌الکتریک‌ها منجر به تولید حداکثری الکترون‌ها در این نواحی می‌شود. برای مقایسه جذر میانگین مربعی چگالی ذرات فوق پایدار برای تخلیه نیتروژنی و تخلیه با ترکیب گازی ٪۹۰ نیتروژن-٪۱۰ اکسیژن در شکل۷ رسم شده است. همان‌طوری که در این شکل مشاهده می‌شود، حضور ٪۱۰ گاز اکسیژن به‌طور قابل توجهی سبب افزایش چگالی ذرات فوق پایدار N_2a و کاهش چگالی ذرات N_2A در فضای تخلیه می‌شود. این نتیجه به‌این خاطر است که ذرات فوق پایدار N_2A به‌طور گسترده در واکنش با اتم‌ها و مولکول‌های اکسیژن (R_{30}، R_{31}، وR_{32}) شرکت می‌کنند تا رادیکال‌های آزاد اکسیژن را تولید کنند. همچنین این ذرات از طریق واکنش‌های R_{14} و R_{15} ذرات تابش کننده N_2B و N_2C را تولید می‌کنند. بنابراین انتظار می‌رود تابش‌های پلاسما نیز در نواحی نزدیک به دی‌الکتریک‌ها در هر نیم چرخه بیشتر باشد. درستی این نتیجه در شکل۸ نشان داده شده است. برای مقایسه تابش‌های پلاسما در تخلیهٔ نیتروژنی خالص و تخلیه با ترکیب ٪۹۰ نیتروژن- ٪۱۰ اکسیژن، جذر میانگین مربعی چگالی تعداد ذرات N_2B و N_2C در شکل۹ ترسیم شده است. همان‌طوری که در این شکل مشاهده می‌شود، تابش‌های پلاسما در تخلیهٔ نیتروژنی خالص بیشتر از تابش‌های پلاسما در ترکیب ٪۹۰ نیتروژن-٪۱۰ اکسیژن است. این پدیده به‌این خاطر است که در تخلیه ٪۹۰ نیتروژن-٪۱۰ اکسیژن، ذرات برانگیخته N_2B و N_2C در واکنش‌های R_{35} و R_{36} به‌طور گسترده شرکت می‌کنند تا در واکنش با مولکول‌های اکسیژن، آن‌ها را شکسته و به اتم اکسیژن تبدیل کنند. بنابراین اضافه کردن ٪۱۰ اکسیژن به تخلیه نیتروژنی سبب کاهش تابش‌های پلاسما می‌شود. در میان ذرات فعال اکسیژنی، اوزون از طریق اکسید کردن دیوارهٔ سلولی میکروارگانیسم‌ها سبب مرگ سلولی

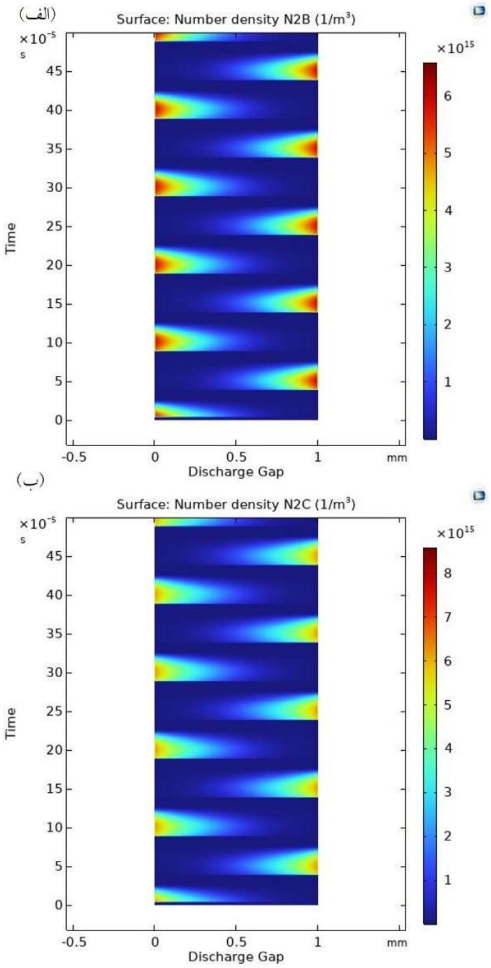
آن‌ها می‌شود. بدین ترتیب این ذره نقش مهمی را در استریلیزه کردن وکنترل آلودگی ها بازی می‌کند [۸]. شکل۱۰ توزیع فضا-زمانی چگالی اوزون را نشان می‌دهد. همان‌طوری که در این شکل مشاهده می‌شود چگالی اوزون‌ها در ابتدا در فضای تخلیه به‌شدت بالا است که با گذشت زمان مقدار آن به‌سمت مقادیر کمتر میل می‌کند چون ذرات اوزون به‌طور مؤثر در واکنش با اتم‌های اکسیژن ($R_{۲٤}$) شرکت می‌کنند تا به حالت $O_۲$ باز گردند.



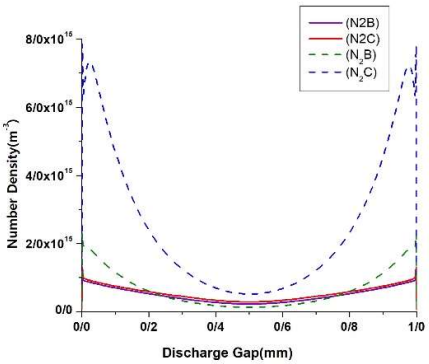
شکل٦. تحولات فضا-زمانی ذرات فوق پایدار الف: N_2A و ب: N_2a.



شکل۷. نمودار لگاریتمی توزیع ذرات فوق پایدار در لحظه بیشینه جریان برای تخلیه با گاز نیتروژن خالص (خط چین) و تخلیه با ترکیب گازی٪۹۰ نیتروژن- ٪۱۰ اکسیژن (خط کامل).

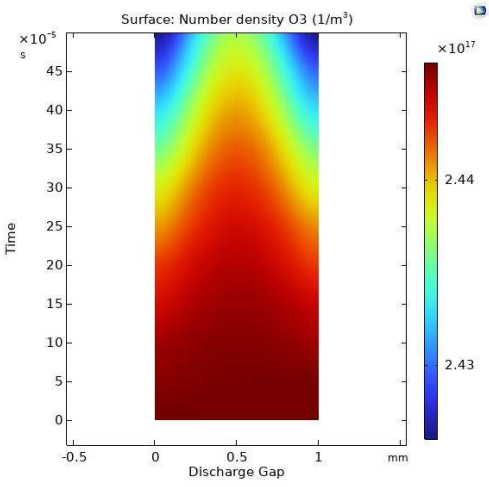


شکل۸. توزیع فضا-زمانی چگالی ذرات تابشی نیتروژن.



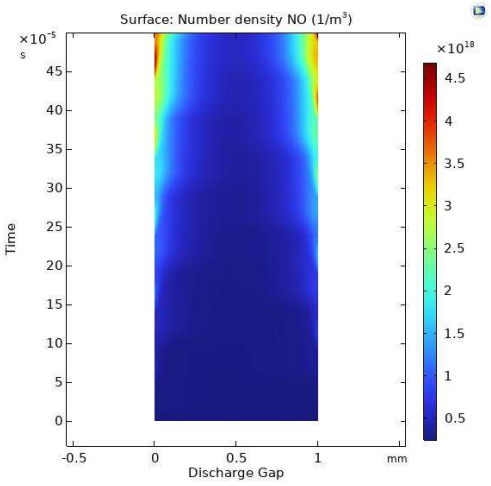
شکل۹. جذر میانگین مربعی ذرات برانگیخته برای تخلیه با گاز نیتروژن خالص (خط چین) و تخلیه با ترکیب گازی٪۹۰ نیتروژن–٪۱۰ اکسیژن (خط کامل).

با این وجود، چون چگالی این ذرات در مقادیر کم هم از مرتبه$۱۰^{۱۷}/m^{۳}$ است و دورهٔ تخلیه از مرتبهٔ چند میکروثانیه است درحالی‌که طول عمر این ذرات از مرتبهٔ چند دقیقه است، لذا این ذرات می‌توانند تا مدتی درون فضای تخلیه باقی بمانند [۹]. همچنین با توجه به‌شکل می‌توان دید که توزیع این ذرات در فضای تخلیه تقریباً به‌صورت یکنواخت است. یکی دیگر از ذرات فعالی که نقش مهمی را در فرآیند استریلیزاسیون بازی می‌کند رادیکال‌های NO هستند.



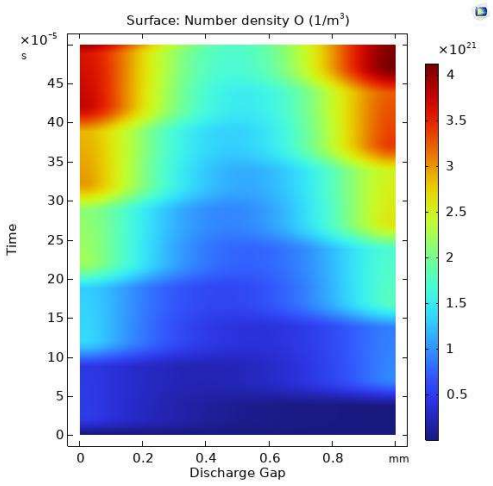
شکل۱۰. توزیع فضا–زمانی اوزون.

این ذرات به‌خاطر اندازه کوچک و چربی دوستی به‌راحتی می‌توانند از غشاهای بیولوژیکی عبور کنند [۱۰]. بدین ترتیب این ذرات نیز نقش مهمی را در فرآیند استریلیزاسیون بازی می‌کنند. همچنین، این ذرات گرچه ممکن است به‌عنوان یک آلاینده در برخی کاربردها دیده شود اما در اصلاح سطح نقش واسطه دارند چون می‌توانند به آرامی روی سطح جذب شوند و فرآیند تزریق نیتروژن به سطح را تسهیل کنند [۱۲]. شکل۱۱ توزیع فضا–زمانی چگالی ذرات NO را در فضای تخلیه نشان می‌دهد. همان‌طور که در این شکل مشاهده می‌شود، چگالی ذرات NO با افزایش زمان در فضای تخلیه افزایش می‌یابد.



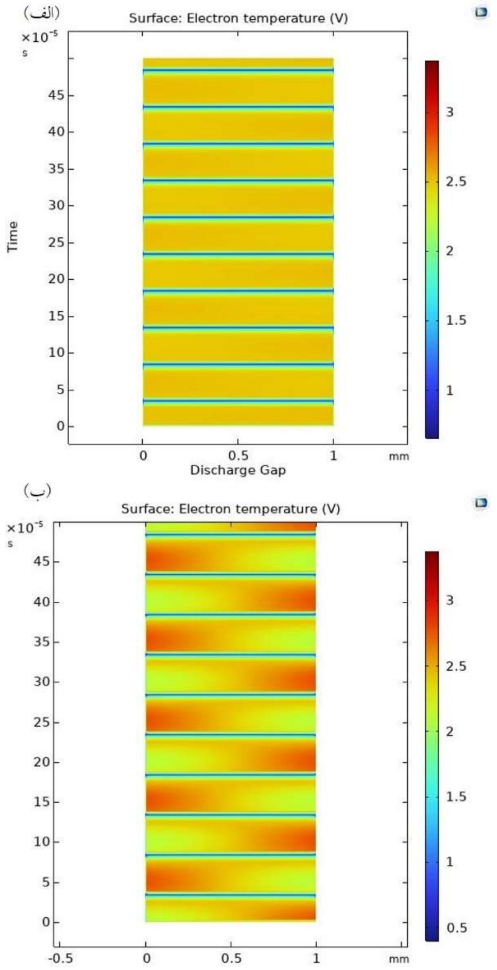
شکل۱۱. توزیع فضا–زمانی NO در فضای تخلیه.

بدین ترتیب حضور این ذرات سبب بهبود کیفیت اصلاح سطوح می‌شود. یکی دیگر از ذراتی که نقش مهمی را در کاربردهای پزشکی بازی می‌کند، اتم‌های اکسیژن هستند که توزیع فضا–زمانی آن‌ها در این تخلیه در شکل۱۲ نشان داده شده است. همان‌طوری که در این شکل مشاهده می‌شود، چگالی تعداد این ذرات با افزایش زمان افزایش می‌یابد.



شکل۱۲. توزیع فضا-زمانی اتم‌های اکسیژن

همچنین تعداد این ذرات در مقایسه با ذرات فعال دیگر از جمله اوزون و NO نیز بیشتر است. بنابراین مهم‌ترین رادیکال آزاد در تخلیه ٪۹۰ نیتروژن- ٪۱۰ اکسیژن رادیکال‌های اکسیژن است. این نتایج بیان می‌کنند که این ترکیب گازی می‌تواند ترکیب مناسبی برای فرآیندهای استریلیزاسیون باشد. همچنین این ذرات نقشی کلیدی را در اصلاح سطوح پلیمرها بازی می‌کنند چون این ذرات از طریق نفوذ به‌سطح پلیمرها سبب شکستن پیوندهای C-H یا C-C و جایگزینی آن‌ها با گروه‌های عاملی مانند C=O و یا ایجاد گروه‌های هدروکسیلی می‌شود. شکل۱۳ مقایسه دمای الکترونی را در تخلیه با الف: گاز نیتروژن خالص و ب: ترکیب گازی ٪۹۰ نیتروژن-٪۱۰ اکسیژن نشان می‌دهد. همان‌طوری که در این شکل مشاهده می‌شود دمای الکترون‌ها در تخلیه با ترکیب ٪۹۰ نیتروژن- ٪۱۰ اکسیژن بیشتر از دمای الکترون‌ها در تخلیه با گاز نیتروژن خالص است. این امر سبب می‌شود که واکنش‌های الکترونی به‌طور موثرتری در تخلیه با ترکیب گازی ٪۹۰ نیتروژن- ٪۱۰ اکسیژن نسبت به‌تخلیه در گاز نیتروژن خالص انجام شوند. همچنین می‌توان مشاهده کرد که در تخلیه با گاز نیتروژن خالص، دمای الکترون‌ها تقریباً در تمام چرخه‌ها ثابت است.



شکل۱۳. مقایسهٔ دمای الکترون‌ها در الف: تخلیه با گاز نیتروژن خالص و ب: تخلیه با ترکیب گازی ٪۹۰ نیتروژن- ٪۱۰ اکسیژن

نتیجه گیری و بحث

در این مقاله شبیه‌سازی یک بعدی تخلیه الکتریکی با مانع دی‌الکتریک در گاز نیتروژن فشار اتمسفری با افزودن ٪۱۰ اکسیژن انجام شد. این نتیجه به‌دست می‌آید که افزودن تنها ٪۱۰ اکسیژن سبب افزایش تعداد الکترون‌ها و دمای آن‌ها، افزایش یون‌های O_2^+، کاهش ذرات فوق‌پایدار N_2A، افزایش ذرات فوق پایدار N_2a، کاهش تابش‌های پلاسما، تولید اوزون، افزایش چگالی

NO، و رادیکال‌های آزاد اکسیژن می‌شود که آن را ترکیب مناسبی برای اصلاح سطوح و استریلیزاسیون تبدیل می‌کند. افزایش دمای الکترونی نشان دهنده فعال‌تر شدن پلاسما از نظر شیمیایی می‌شود. بدین ترتیب ترکیب ٪۹۰نیتروژن–٪۱۰ اکسیژن در عین حال که پلاسمای نسبتاً پایداری تولید می‌کند که با وجود ٪۱۰ اکسیژن به قوس یا جرقه و یا تخلیهٔ رشته‌ای تبدیل نمی‌شود، یک ترکیب مناسب برای اصلاح سطوح و استریلیزاسیون نیز به‌شمار می‌رود.

مرجع‌ها

[1] A. Barjasteh, et al., Cold atmospheric pressure plasma: a growing paradigm in diabetic wound healing-mechanism and clinical significance. International Journal of Molecular Sciences, 24 (2023) 16657. DOI: 10.3390/ijms242316657.

[2] A. Barjasteh, et al., Recent progress of non-thermal atmospheric pressure plasma for seed germination and plant development: current scenario and future landscape. Journal of Plant Growth Regulation. 42(2023) 5417–5432. DOI: 10.1007/s00344-023-10979-0.

[3] A. Barjasteh, et al., Cold Atmospheric Pressure Plasma Solutions for Sustainable Food Packaging. International Journal of Molecular Sciences, 25(2024) 6638. DOI: 10.3390/ijms25126638.

[4] Y. Choi, J. Kim, and Y. Hwang, One-dimensional discharge simulation of nitrogen DBD atmospheric pressure plasma. Thin Solid Films. 506 (2006). 389–395. DOI: 10.1016/J.TSF.2005.08.103

[5] T. Kisch., et al., The repetitive use of non-thermal dielectric barrier discharge plasma boosts cutaneous microcirculatory effects. Microvascular Research, 106(2016) 8–13. DOI: 10.1016/j.mvr.2016.02.008.

[6] G. Isbary, et al., A first prospective randomized controlled trial to decrease bacterial load using cold atmospheric argon plasma on chronic wounds in patients. British Journal of Dermatology, 163(2010) 78–82. DOI: 10.1111/j.1365-2133.2010.09744.x.

[7] F. Sohbatzadeh, and H. Soltani, Time-dependent one-dimensional simulation of atmospheric dielectric barrier discharge in $N_2/O_2/H_2O$ using COMSOL Multiphysics. Journal of Theoretical and Applied Physics. 12 (2018) 53–63. DOI: 10.1007/s40094-018-0281-4.

[8] J. Liu, et al., Plasma-assisted ammonia synthesis in a packed-bed dielectric barrier discharge reactor: effect of argon addition .Vacuum, 197 (2022) 110786. DOI: 10.1016/j.vacuum.2021.110786.

[9] M. Akter, et al., Inactivation of infectious bacteria using nonthermal biocompatible plasma cabinet sterilizer. International Journal of Molecular Sciences, 21 (2020) 8321. DOI: 10.3390/ijms21218321.

[10] J. McClurkin, .et al., Half-life time of ozone as a function of air movement and conditions in a sealed container. Journal of Stored Products Research, 55 (2013) 41–47. https://doi.org/10.5073/jka.2010.425.167.326.

[11] C.V. Suschek, et al., The application of cold atmospheric plasma in medicine: The potential role of nitric oxide in plasma-induced effects. Clinical Plasma Medicine, 4 (2016) 1–8.

https://doi.org/10.1016/j.cpme.2016.05.001.

[12] O. Nedela, et al., Surface modification of polymer substrates for biomedical applications. *Materials*, 10 (2017) 1115.