

VĚDECKÉ SPISY VYSOKÉHO UČENÍ TECHNICKÉHO V BRNĚ

Edice Habilitační a inaugurační spisy, sv. 182

ISSN 1213-418X

Milada Bartlová

RADIAČNÍ VLASTNOSTI PLAZMATU ELEKTRICKÉHO OBLOUKU

VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ
Fakulta elektrotechniky a komunikačních technologií
Ústav fyziky

RNDr. Milada BARTLOVÁ, Ph.D.

**RADIAČNÍ VLASTNOSTI PLAZMATU
ELEKTRICKÉHO OBLOUKU**

**RADIATION PROPERTIES
OF ELECTRIC ARC PLASMA**

ZKRÁCENÁ VERZE HABILITAČNÍ PRÁCE



BRNO 2005

KLÍČOVÁ SLOVA

Termické plazma, elektrický oblouk, radiální přenos energie, absorpční koeficienty

KEYWORDS

Thermal plasma, electric arc, radiation energy transfer, absorption coefficients

MÍSTO ULOŽENÍ PRÁCE

FEKT VUT v Brně

OBSAH

OBSAH	3
1 ÚVOD	5
2 ROVNICE PŘENOSU ZÁŘENÍ	6
3 RADIAČNÍ VLASTNOSTI PLAZMATU	7
3.1 Koeficient absorpce atomů.....	9
3.1.1 <i>Spojité spektrum</i>	9
3.1.2 <i>Diskrétní spektrum</i>	11
3.2 Koeficient absorpce dvouatomových molekul.....	14
3.2.1 <i>Pásové spektrum</i>	14
3.2.2 <i>Spojité spektrum – fotodisociace molekul</i>	16
4 NUMERICKÝ VÝPOČET KOEFICIENTŮ ABSORPCE	19
5 ZÁVĚR.....	21
LITERATURA.....	22
ABSTRACT.....	24



RNDr. Milada Bartlová, Ph.D. se narodila 5. května 1960 v Hodoníně. Vysokoškolské studium zahájila v roce 1979 na Přírodovědecké fakultě Masarykovy univerzity v Brně, obor „Fyzikální elektronika a optika“, od roku 1981 pokračovala ve studiu na Matematicko-fyzikální fakultě Univerzity Karlovy v Praze, obor „Fyzika mezních oborů – matematická fyzika“, kde studium úspěšně zakončila v roce 1984 a získala titul RNDr.

Po ukončení VŠ v roce 1984 nastoupila na Ústav speciální elektrotechniky a jakosti SVVÚ VUT v Brně jako odborný pracovník. V letech 1987–1990 a 1991–1994 byla na mateřské dovolené.

V letech 1993–1995 absolvovala doplňující studium Didaktiky fyziky na MU v Brně.

V letech 1992–1999 na MU v Brně úspěšně absolvovala externí aspiranturu v oboru „11-25-9: Fyzika plazmatu“ s disertační prací na téma „Rychlostní konstanty plazmochemických reakcí v SF₆“ a byl jí udělen titul Ph.D.

Od roku 1998 působí jako odborný asistent na Ústavu fyziky FEKT VUT v Brně.

V roce 2000 absolvovala dvouměsíční studijní pobyt v rámci stipendia NATO DAAD na Institutu fyzikální chemie Univerzity Göttingen v Německu. V letech 2001–2002 absolvovala 3 krátkodobé pobyty (celkem 4 týdny) na RWTH Aachen v Německu v rámci dvoustranné vědecko-technické spolupráce (AIP) a projektu KONTAKT.

Do pedagogické práce se zapojila od roku 1994 (ještě jako odborný pracovník na USEJ) jako externí učitel na Ústavu fyziky FEKT VUT (teoretické cvičení z Fyziky I, II, III). Od roku 1998 působí na Ústavu fyziky jako odborný asistent, podílí se na přednáškách v 1 předmětu (Fyzika I), a na cvičeních ve 3 předmětech (Fyzika I, Fyzika II, Fyzikální seminář).

Její vědecko-výzkumná činnost je zaměřena na matematické modelování plazmatu v různých zařízeních pracujících s termálním plazmatem (plazmatrony, zhášecí komory vn vypínačů apod.). Konkrétně se zabývá studiem radiálních vlastností atomů a molekul a teoretickými výpočty radiálního transportu energie a rychlostních konstant plazmochemických reakcí.

Během zaměstnání na VUT v Brně se účastnila řešení řady výzkumných projektů, byla spoluřešitelem projektu GA 202/02/1027 „Studium procesů ovlivňujících radiální transport energie v obloukovém výboji s kapalinovou stabilizací“ (hlavní řešitel Dr. Jeništa z Ústavu fyziky plazmatu AV ČR v Praze).

Je autorem nebo spoluautorem 56 publikací (11 článků ve vědeckých časopisech, zbytek příspěvků na konferencích, většinou na mezinárodní úrovni).

Je členem organizačního výboru konference „Fyzika spínacího oblouku“ pořádané jednou za dva roky Ústavem výkonové elektrotechniky a elektroniky FEKT VUT v Brně.

Je členem Jednoty českých matematiků a fyziků a členem International Plasma Chemistry Society.

1 ÚVOD

Radiační přenos energie hraje důležitou roli v mnoha zařízeních využívajících plazmové procesy, např. při tvorbě povrchů specifických vlastností, pro syntézu látek, likvidaci škodlivin a plazmovou metalurgii [1]. Jetý termálního plazmatu vznikají v plazmových generátorech s elektrickým obloukem. Obvyklé generátory obloukového plazmatu (plazmatrony) pracují s elektrickým obloukem stabilizovaným prouděním plynu, obvykle argonu, dusíku nebo směsí těchto plynů s vodíkem nebo heliem. Směsi argonu a vodní páry se vyskytují v hybridních plazmových jetech s kapalinovou a plynovou stabilizací [2].

Elektrické (spínací) oblouky ve výkonových vypínačích jsou další důležitou aplikací termálního plazmatu. Přenos záření je dominantní mechanismus výměny energie během vysokoproudové periody vypínacího procesu. Nejvýhodnějším typem vypínačů z hlediska zhašecích schopností jsou vypínače typu self-blast s náplní SF₆ (hexafluorid síry). Spínací oblouk, resp. plazma hoří uvnitř úzké trysky ze syntetického materiálu, PTFE (polytetrafluoretylén). V důsledku vysoké emise záření z oblouku dochází k disociaci a ionizaci plynného média, k ablaci materiálu trysky a k vypařování kovových elektrod, což způsobuje přetlak uvnitř trysky a proud plynu do vypínače.

Získat informace o fyzikálních procesech probíhajících v oblouku během vypínání nebo je předpovědět na základě měření je v podstatě nemožné kvůli vysokému tlaku a teplotě uvnitř trysky. Během posledních let byly vyvinuty počítačové modely dynamiky plynů (CFD) popisující fyzikální procesy probíhající během vypínání vysokých proudů, které se staly velmi účinným nástrojem pro výzkum a průmyslový vývoj [3], [4]. Podrobné informace o lokální struktuře oblouku a lokálním rozdělení ablace mohou být získány pouze pomocí radiačních modelů, které umožňují určit rozdělení emise a absorpce v celé výpočetní oblasti.

Experimentální sledování radiačního přenosu je velmi obtížné v důsledku extrémních podmínek – vysoké teploty, tlaku, rychlosti plynu atd. V takových případech je velmi důležité matematické modelování. Nelinearita rovnic popisujících radiační pole a silná závislost vstupních parametrů na frekvenci záření a vlastnostech média vedou však k velmi komplikovaným matematickým modelům plazmatu, jejichž přesné řešení je prakticky nemožné.

Bylo vypracováno několik aproximativních metod výpočtu; jednou z nich je metoda parciálních charakteristik [5], [6], která umožňuje respektování absorpce ultrafialového záření emitovaného z vysokoteplotní oblasti jádra oblouku, v jeho chladných okrajových částech. Pomocí této metody je možné oddělit časově náročný výpočet pole záření od dynamických rovnic. Nejdříve jsou spočítány a tabelovány speciální integrální parametry přenosu záření – parciální charakteristiky – které jsou funkcemi tlaku a teploty. Výpočet energetické bilance plazmatu spočívá pak v počítačovém vyhledání odpovídajících funkcí v předem vypočtených tabulkách a v jejich integraci přes všechny prostorové úhly. Předem vypočítaná data parciálních charakteristik dávají možnost řešit radiační přenos nejen pro jednoduchou symetrii plazmatu, ale i pro libovolnou geometrii [7], [8]. Navíc tabulky parciálních charakteristik umožňují řešit problémy přenosu záření odborníkům na dynamiku plynů, aniž by museli mít hlubší znalosti z teorie záření.

Jednou z nutných podmínek pro určení parciálních charakteristik je znalost koeficientů absorpce plynného média. Předkládaná práce je věnována přípravě a shromáždění atomárních a molekulárních dat (radiačních účinných průřezů fotoionizace, fotodisociace a brzděného záření, rozšíření a posuvu spektrálních čar, sil oscilátorů, pravděpodobností přechodů, intenzit molekulárních pásů, Franckových-Condonových faktorů molekulárních elektronových přechodů atd.), které slouží jako vstupní data pro výpočet koeficientů absorpce. Tato práce je značně časově náročná, vyžaduje vyhledávání dat v dostupných databázích na Internetu (např. [9], [10], [11], [12]) a v literatuře a v doplnění těchto údajů teoretickými výpočty ve frekvenčních a teplotních intervalech, kde tato data nejsou k dispozici.

Předložená práce má teoretický charakter. Hlavním cílem bylo vypracování metodiky aproximačního výpočtu absorpčních koeficientů pro atomy a dvouatomové molekuly, ověření použitelnosti srovnáním vypočítaných hodnot s dostupnými údaji v literatuře a databázích, rozšíření těchto údajů do požadovaných teplotních a frekvenčních intervalů a příprava vstupních dat pro výpočet koeficientů absorpce a parciálních charakteristik směsí plazmatu SF₆ s PTFE s příměsí mědi, směsí SF₆ s argonem, plazmatu H₂O a směsí H₂O a argonu.

Na základě výsledků uvedených v práci byly vytvořeny tabulky parciálních charakteristik pro plazma H₂O a jeho směsi s argonem, dále pro směsi SF₆ s PTFE a parami mědi a pro směsi SF₆ s argonem. Databanka parciálních charakteristik umožňuje určit pole záření v hybridních plazmových jetech a v plazmatu spínacího oblouku.

2 ROVNICE PŘENOSU ZÁŘENÍ

Plazma elektrických výbojů přenáší poměrně velké množství energie. Energetickou bilanci ve stacionárním stavu popisuje zjednodušená *Elenbaasova-Hellerova rovnice* [13] (při zanedbání tepelné konvekce a turbulence)

$$\sigma E^2 = \operatorname{div} \vec{q}_T + \operatorname{div} \vec{q}_R, \quad (2.1)$$

σE^2 je elektrická energie přiváděná do objemového elementu plazmatu (σ je elektrická vodivost, E intenzita elektrického pole), \vec{q}_T, \vec{q}_R představují toky energie způsobené tepelnou kondukcí a zářením.

Tok záření je vektorová veličina, má směr dráhy fotonu

$$\vec{q}_R = \int_0^\infty \int_{4\pi} I_\nu(\vec{s}) \vec{s} d\Omega d\nu, \quad (2.2)$$

spektrální intenzita záření I_ν je tok radiční energie dané frekvence jednotkovým prostorovým úhlem a jednotkovou plochou kolmou na směr paprsku, při výpočtu toku záření se integruje přes všechny frekvence a celý prostorový úhel.

Při průchodu záření plynným médiem, resp. plazmatem je každá změna v intenzitě záření podél dané dráhy způsobena absorpcí, emisí nebo rozptylem záření. Při studiu přenosu tepla zářením je rozptyl záření na molekulách zanedbatelný.

Absorpce je přímo úměrná velikosti počáteční energie a vzdálenosti, kterou svazek urazil v médiu:

$$(dI_\nu)_{abs} = -\kappa_\nu I_\nu ds, \quad (2.3)$$

kde konstanta úměrnosti κ_ν je *spektrální absorpční koeficient*.

Emitovaná intenzita je úměrná délce dráhy, podél které paprsek sledujeme

$$(dI_\nu)_{em} = \varepsilon_\nu ds, \quad (2.4)$$

kde ε_ν je *koeficient emise*. Změna intenzity způsobená absorpcí i emisí je tedy

$$\frac{dI_\nu}{ds} = -\kappa_\nu I_\nu + \varepsilon_\nu. \quad (2.5)$$

V termodynamické rovnováze

$$\varepsilon_\nu = \kappa_\nu I_{b\nu}, \quad (2.6)$$

kde $I_{b\nu}$ je Planckova funkce (spektrální intenzita rovnovážného záření).

Rovnice přenosu záření v absorbujiícím a emitujiícím prostředí je pro kvazistacionární případ (rozložení teploty a pole záření nejsou závislé na čase)

$$\frac{dI_\nu}{ds} \equiv \vec{s} \cdot \nabla I_\nu = \kappa_\nu (I_{b\nu} - I_\nu). \quad (2.7)$$

Řešení této rovnice má tvar

$$I_\nu(x) = \int_0^x \kappa_\nu(s) I_{b\nu}(s) e^{-\int_0^s \kappa[s'] ds'} ds. \quad (2.8)$$

Pro energetickou bilanci plazmatu v Elenbaasově-Hellerově rovnici (2.1) musíme znát *divergenci toku záření*. Z definice toku záření (2.2) plyne po dosazení za intenzitu (2.8):

$$\vec{q}_R(x) = \int_{4\pi} I(x, \vec{s}) \vec{s} d\Omega = \int_{4\pi} \int_0^x \int_0^\infty \vec{s} \kappa_\nu(s) I_{b\nu}(s) e^{-\int_0^s \kappa(s') ds'} ds dv d\Omega \quad (2.9)$$

$$\nabla \vec{q}_R(x) = \int_{4\pi} \nabla I(x, \vec{s}) \vec{s} d\Omega = \int_{4\pi} \int_0^x \kappa_\nu(x) I_{b\nu}(x) dv d\Omega - \int_{4\pi} \int_0^x \int_0^\infty \kappa_\nu(x) \kappa_\nu(s) I_{b\nu}(s) e^{-\int_0^s \kappa(s') ds'} ds dv d\Omega \quad (2.10)$$

Výpočet divergence toku záření je velmi komplikovaný, byla vypracována řada přibližných metod používajících zjednodušení fyzikálních jevů i matematických operací. Jednou z nich je metoda parciálních charakteristik [5], [6]. Pomocí této metody je možné oddělit integraci přes frekvence od integrace přes prostorové úhly a oddělit tak časově náročný výpočet pole záření od dynamických rovnic. Nejdříve jsou spočítány a tabelovány speciální integrální parametry přenosu záření – parciální charakteristiky, které jsou funkcemi tlaku a teploty. Výpočet energetické bilance plazmatu spočívá pak v počítačovém vyhledání odpovídajících funkcí v předem vypočtených tabulkách a v jejich integraci přes všechny prostorové úhly.

Jako vstupní data vystupují v rovnicích (2.9), (2.10) koeficienty absorpce. Jejich určení je rovněž velmi komplikované, neboť reálná spektra horkých plynů obsahují tisíce spektrálních čar atomů, iontů a molekul. Cílem této práce je určování absorpčních koeficientů spojitého spektra, diskrétního spektra atomů a iontů a spektra dvouatomových molekul.

3 RADIAČNÍ VLASTNOSTI PLAZMATU

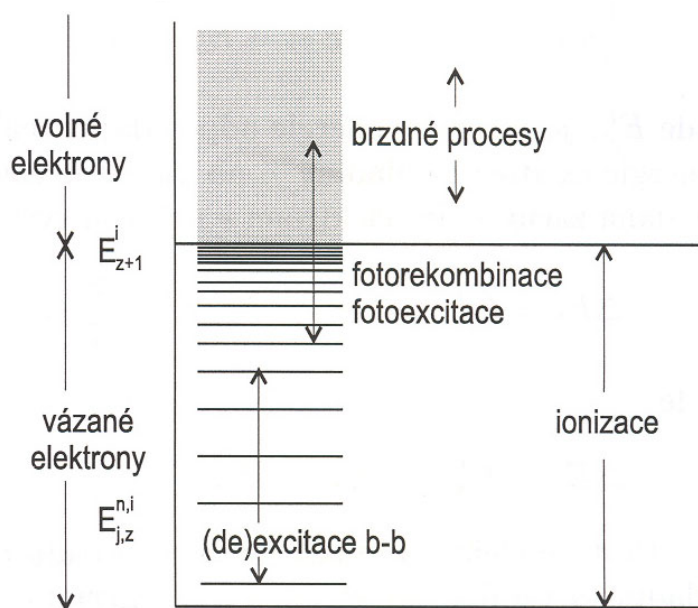
Podle kvantové mechaniky je ve vnitřní struktuře atomů a molekul možný jen konečný počet diskrétních energetických hladin. Elektrony mohou obíhat kolem jader pouze po určitých povolených drahách, vibrace mezi jádry mohou mít jen určitý počet různých amplitud a jádra mohou rotovat kolem sebe pouze s určitým počtem rotačních rychlostí. Proto změna vnitřní energie mole-

kuly nebo atomu může být provázána pohlcením nebo vyzářením fotonu o určité energii $h\nu$, tj. o určité frekvenci, resp. vlnové délce. Změna dráhy elektronu vyžaduje relativně velké množství energie, proto při ní dochází k absorpci – emisi čar v ultrafialové a viditelné části spektra. Změna vibračních a rotačních hladin molekuly vyžaduje menší množství energie a spektrum absorbovaných nebo emitovaných fotonů (spektrálních čar) leží v infračervené oblasti. Změny vibrační energie jsou přitom obvykle provázány současně i změnami energie rotační a vibrační čáry jsou proto obklopeny systémem rotačních čar, tzv. vibračně-rotační pásy molekul tvoří pásové spektrum.

Pokud teplota plynu není příliš vysoká, nevyskytují se v něm ionty a volné elektrony. Absorpce a emise fotonů vede na *vázaně-vázané přechody* (označují se $bb = bound-bound$) a *diskrétní spektrum* (obr. 3.1). Vede-li absorpce fotonu o dostatečně velké energii k ionizaci a uvolnění elektronu, případně k disociaci molekuly, jde o *vázaně-volný přechod* ($bf = bound-free$). Naopak rekombinuje-li volný elektron s iontem, vzniká neutrální atom a foton (radiální rekombinace), jde o *volně-vázaný přechod*. Konečně volný elektron může absorbovat nebo emitovat fotony při zvyšování nebo snižování své kinetické energie působením elektrických polí ostatních nabitých částic v plynu (*Bremsstrahlung* = brzdné záření), mluvíme o *volně-volných přechodech* ($ff = free-free$). Všechny volně-volné, volně-vázané a vázaně-volné přechody vytváří *spojité spektrum*, jsou možné pro fotony libovolných frekvencí. Vázaně-volné a volně-volné přechody se obvykle vyskytují při velmi vysokých teplotách, kdy se stává podstatnou disociace a ionizace. Spojité záření s nimi spojené se obvykle nachází v oblasti krátkých vlnových délek (ultrafialové nebo viditelné záření).

Koeficient absorpce lze vyjádřit jako součet koeficientů absorpce jednotlivých procesů

$$\kappa = \kappa^{ff} + \kappa^{bf} + \kappa^{bb} \quad (3.1)$$



Obr. 3.1 Typy elektronových přechodů v atomu nebo iontu [14].

Se zachycením nebo uvolněním fotonu jsou spojeny tři procesy – spontánní emise, indukovaná emise a (indukovaná) absorpce. Absorpční a emisní koeficienty spojené s těmito přechody (pravděpodobnosti přechodů) mohou být teoreticky spočítány na základě kvantové mechaniky.

Pro celkový spektrální absorpční koeficient (zahrnuje i indukovanou emisi) platí

$$\kappa_\nu = (N_j B_{ji} - N_i B_{ij}) h \nu, \quad (3.2)$$

kde B_{ji} je *Einsteinův koeficient pro absorpci* a B_{ij} je *Einsteinův koeficient pro indukovanou emisi*. Při určování koeficientů absorpce pro různé typy přechodů se počítá s tzv. „pravou absorpcí“ (bez indukované emise)

$$\kappa'_\nu = N_j B_{ji} h \nu, \quad (3.3)$$

kde N_j je obsazení nižšího energetického stavu. Celkový spektrální absorpční koeficient (zahrnuje pravou absorpci i indukovanou emisi) je pak

$$\kappa_\nu = \kappa'_\nu (1 - e^{-h\nu/kT}). \quad (3.4)$$

Pravděpodobnost přechodu systému ze stavu j do stavu i pohlcením fotonu o energii $h\nu_{ij} = E_i - E_j$ (Einsteinův koeficient B_{ji}) lze nalézt na základě řešení Schrödingerovy rovnice pro atomový nebo molekulární systém, kde vystupuje Hamiltonián elektromagnetického pole záření jako malá porucha (poruchová teorie). V dipólovém přiblížení je [15]

$$B_{ji} = \frac{4\pi^2}{3\varepsilon_0 \hbar^2 c_0} g_j |\langle i | D | j \rangle|^2, \quad (3.5)$$

kde c_0 je rychlost světla ve vakuu, g_j je stupeň degenerace dolní energetické hladiny a

$$|\langle i | D | j \rangle|^2 \equiv \left| \left\langle \psi_i^{0*} \left| \sum_k e_k \vec{r}_k \right| \psi_j^0 \right\rangle \right|^2. \quad (3.6)$$

$\vec{D} = \sum e_k \vec{r}_k$ je elektrický dipólový moment systému.

Ve spektroskopii se zavádí bezrozměrná veličina – *síla oscilátoru* (z analogie s klasickou teorií záření)

$$f_{ij} = \frac{4m_e \pi \nu_{ij}}{3e^2 \hbar} g_j |\langle i | D | j \rangle|^2, \quad (3.7)$$

kde m_e je hmotnost a e náboj elektronu, $E_i - E_j = h\nu_{ij}$ je rozdíl energií vyššího a nižšího energetického stavu.

3.1 KOEFICIENT ABSORPCE ATOMŮ

3.1.1 Spojité spektrum

Spojité záření vzniká při přechodech elektronů mezi dvěma energetickými stavy, z nichž alespoň jeden je volný. Jde o vázaně-volné (bf) a volně-volné (ff) přechody.

Volný elektron může být zachycen atomem nebo iontem a přejít tak do vázaného stavu. Uvolněná energie, která je rovna součtu kinetické energie volného elektronu a jeho vazebné energie, se vyzáří ve formě *rekombinačního záření*. Volné elektrony mohou mít libovolnou hodnotu energie, proto fotony vyzářené při rekombinaci vytvářejí spojité spektrum záření. Naopak dopadali na atom nebo iont foton o dostatečně velké energii, která přesáhne hodnotu vazebné energie elektronu, může dojít k pohlcení fotonu a uvolnění elektronu – *fotoionizace*. Opět jsou pohlcovány

fotony ze spojité oblasti spektra od jisté vlnové délky, které odpovídá dostatečně velká energie fotonu.

Spojité záření vzniká i při průchodu volného elektronu elektrickým polem iontu. V tomto případě se mění rychlost, tj. kinetická energie elektronu (libovolně) a vzniká brzdné záření – *bremstrahlung*.

Koeficient absorpce spojitého spektra je tedy dán součtem koeficientů absorpce pro volně-volné a vázaně-volné přechody

$$\kappa = \kappa^{ff} + \kappa^{bf} . \quad (3.8)$$

Výpočet koeficientů absorpce spojitého záření je velmi komplikovaný, neboť pro určení pravděpodobností příslušných přechodů je třeba znát vlnové funkce všech volných i vázaných kvantových stavů. Byla však vypracována řada semiempirických aproximativních metod, které výpočet značně zjednoduší.

Rovnice fotoionizace má tvar (zákon zachování energie)

$$h\nu = \frac{1}{2} m_e v_e^2 + E_\infty^a - E_i^a , \quad (3.9)$$

ν je frekvence pohlceného fotonu, $\frac{1}{2} m_e v_e^2$ je kinetická energie uvolněného elektronu, E_∞^a ionizační potenciál atomu nebo iontu, E_i^a energie hladiny, z níž je uvolněn elektron. Frekvence ν_i , pro kterou platí

$$h\nu_i = E_\infty^a - E_i^a , \quad (3.10)$$

se nazývá *absorpční hrana*, pohlcení fotonu s touto frekvencí vede k uvolnění elektronu s nulovou kinetickou energií.

Spektrální koeficient absorpce procesu (3.9) lze vyjádřit prostřednictvím fotoabsorpčního účinného průřezu $\sigma_{\nu,i}^a$

$$\kappa_{\nu,i}^{bf} = \sigma_{\nu,i}^a \cdot N_i^a , \quad (3.11)$$

kde N_i^a je hustota obsazení i -té hladiny absorbující částice „ a “. Pro danou spektrální frekvenci, teplotu a tlak můžeme tedy vyjádřit spektrální koeficient absorpce

$$\kappa_\nu^{bf} = \sum_a \sum_i \sigma_{\nu,i}^a \cdot N_i^a , \quad (3.12)$$

kde se sčítá přes všechny hladiny všech atomů a iontů, pro které platí

$$h\nu \geq E_\infty^a - E_i^a . \quad (3.13)$$

Při určování fotoabsorpčních účinných průřezů vycházíme z předpokladu, že pro $\nu > \nu_i$ je frekvenční závislost $\sigma_{\nu,i}$ stejná jako pro vodíku-podobný atom (atomový zbytek s nábojem $Z +$ optický elektron, interakce elektronu s atomovým zbytkem je zanedbatelná) [16]

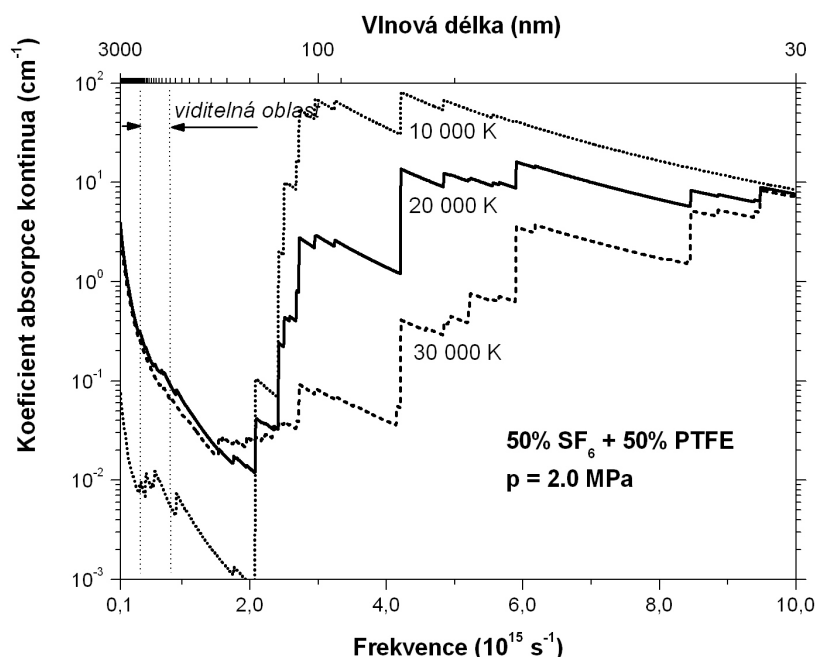
$$\sigma_{\nu,i} = \sigma_{\nu_i,i} \left(\frac{\nu_i}{\nu} \right)^3 , \quad (3.14)$$

kde $\sigma_{\nu_i,i}$ je účinný průřez pro absorpční hranu ν_i .

Účinné průřezy $\sigma_{\nu_i,i}$ pro ionty a vyšší excitované hladiny neutrálních atomů byly určeny pomocí Kramersova vztahu pro vodíku-podobné atomy [17]. Pro určení účinných průřezů foto-

absorpce základní a nejnižších excitovaných hladin neutrálních atomů byla užita aproximativní metoda kvantového defektu [18], [17], [19].

Na obr. 3.2 je ukázka frekvenční závislosti koeficientu absorpce spojitého záření pro plazma SF₆ a PTFE pro tři různé teploty. Se vzrůstající teplotou koeficient absorpce klesá.



Obr. 3.2 Koeficient absorpce spojitého záření plazmatu 50 % SF₆ + 50 % PTFE při tlaku 2 MPa pro tři různé teploty [20].

3.1.2 Diskrétní spektrum

Nechť k -tá spektrální čára komponenty „ a “ (atomu nebo iontu) vznikne přechodem mezi energetickými stavy j a i . S využitím (3.3), (3.5), resp (3.7) dostaneme pro koeficient absorpce spektrální čáry [19]

$$\kappa_{a,k}^{bb} = \pi r_0 c f_{ij}^{a,k} N_j^a P^{a,k}(\nu, T, p) = \sigma_{\nu,ij}^a N_j^a, \quad (3.15)$$

kde

$$r_0 = \frac{e^2}{m_e c^2} \doteq 2,8179 \cdot 10^{-15} \text{ m}$$

je poloměr elektronu, N_j^a je koncentrace atomů v dolním energetickém stavu j a $P^{a,k}$ je *profil čáry*. Závisí na frekvenci, tlaku, teplotě.

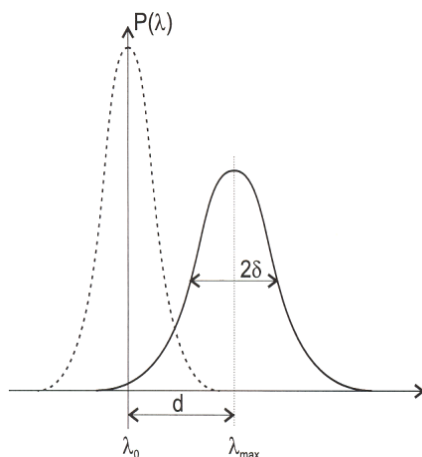
$$\sigma_{\nu,ij}^a = \pi r_0 c f_{ij}^{a,k} P^{a,k}(\nu, T, p) \quad (3.16)$$

představuje účinný průřez fotoabsorpce pro přechod $j \rightarrow i$.

Pro výpočet koeficientu absorpce diskrétního spektra tedy musíme znát složení plazmatu, síly oscilátorů pro uvažované spektrální čáry všech atomů a iontů a pro každou spektrální čáru její profil.

Spektrální čáry nejsou přesně monochromatické, absorpce a emise probíhá přes úzkou oblast frekvencí. Výsledkem je rozšíření a posuv spektrální čáry (obr. 3.3), která má své maximum pro frekvenci ν_{ij} danou kvantovou mechanikou

$$h\nu_{ij} = E_i - E_j. \quad (3.17)$$



Obr. 3.3 Rozšíření a posuv spektrální čáry [14].

Rozšíření spektrální čáry je způsobeno řadou mechanismů:

Přirozené rozšíření spektrální čáry souvisí s kvantovou mechanikou a Heisenbergovými relacemi neurčitosti.

Dopplerovo rozšíření vzniká díky neustálému chaotickému tepelnému pohybu částic.

Tlakové rozšíření souvisí se vzájemnou interakcí částic. Patří sem *Starkovo rozšíření* v důsledku existence elektrických mikropólů v plazmatu, která vznikají díky přítomnosti volných elektronů a iontů, dále *Van der Waalsovo rozšíření* a *rezonanční rozšíření*.

Profil čáry pro tlakové a přirozené rozšíření je dán *Lorentzovým (disperzním) profilem*, který má se zahrnutím spektrálního posuvu tvar

$$P_L(\nu, T, p) = \frac{\delta_{ij}}{\pi \left[(\nu - \nu_{ij} - d_{ij})^2 + \delta_{ij}^2 \right]}, \quad (3.18)$$

kde celková pološířka δ a posuv d jsou dány součtem jednotlivých příspěvků

$$\begin{aligned} \delta &= \delta_s + \delta_R + \delta_V + \delta_p \\ d &= d_s + d_V \end{aligned}$$

Časově nejnáročnější je výpočet Starkova rozšíření δ_s a posuvu d_s , pro který je nutno určit síly oscilátorů všech možných přechodů na dolní i horní energetickou hladinu uvažované spektrální čáry. Výrazy pro výpočet jednotlivých pološířek a posuvů lze nalézt v [16].

Dopplerův profil spektrální čáry je určen Gaussovou funkcí

$$P_D(\lambda) = \frac{1}{\Delta\lambda_p \sqrt{\pi}} \exp \left[- \left(\frac{\lambda - \lambda_0}{\Delta\lambda_p} \right)^2 \right], \quad (3.19)$$

kde

$$\Delta \lambda_p = \lambda_0 \sqrt{\frac{2kT}{mc^2}} . \quad (3.20)$$

V plazmatu oblouku při vysokých tlacích a teplotách je nutno při výpočtu profilu spektrální čáry uvažovat jak Dopplerovské, tak srážkové rozšíření. Ve většině případů jsou oba procesy statisticky nezávislé a výsledný profil je dán konvolucí Dopplerovské (Gaussovy) a Lorentzovy srážkové (disperzní) funkce (*Voigtův profil*)

$$P(a,b) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}\delta_D} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{a}{\pi} \frac{\exp(-y^2)}{(b-y)^2 + a^2} dy, \quad (3.21)$$

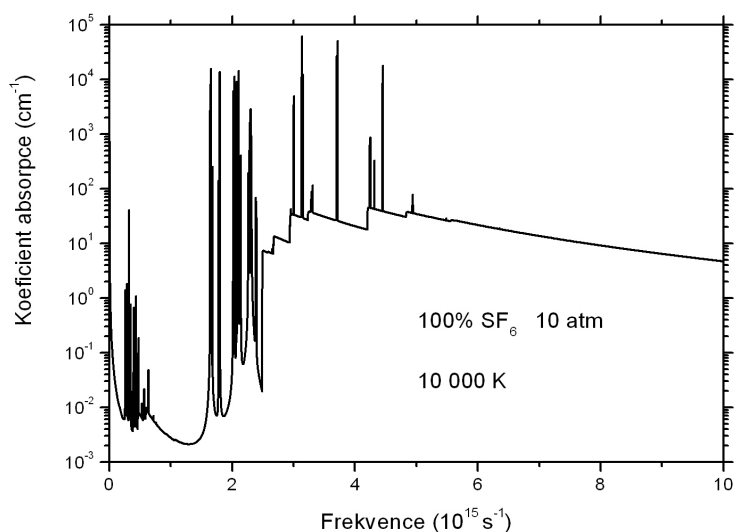
kde

$$a = \sqrt{\ln 2} \times \frac{\delta}{\delta_D}, \quad b = \ln 2 \cdot \frac{\lambda - \lambda_0 - d}{\delta_D},$$

δ , d jsou výsledná pološířka a posuv uvažovaných srážkových mechanismů, δ_D je Dopplerova pološířka.

Absorpční síly oscilátorů některých čar jsou uvedeny v tabulkách [21]. Výpočty dalších sil oscilátorů byly prováděny na základě aproximativních metod a pomocí tabulek pomocných funkcí uvedených v [17].

Celkový koeficient absorpce v závislosti na frekvenci záření pro plazma SF₆ při teplotě 10 000 K a tlaku 10 atm je uveden na obr. 3.4.

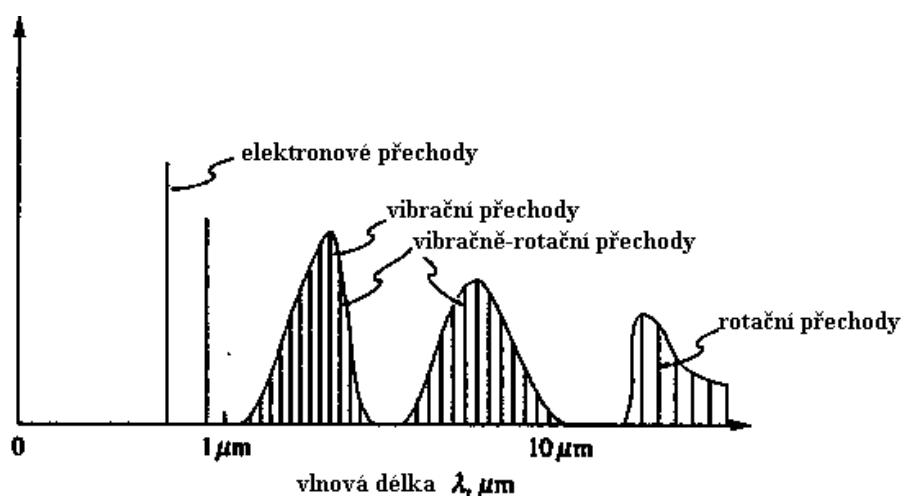


Obr. 3.4 Celkový koeficient absorpce (spojité i diskrétní záření) pro plazma SF₆ [22].

3.2 KOEFICIENT ABSORPCE DVOUATOMOVÝCH MOLEKUL

3.2.1 Pásové spektrum

Energetické stavy molekuly vznikají její rotací jako celku, kmitavým relativním pohybem atomů, z nichž se skládá, a v důsledku změn její elektronové konfigurace. *Rotační stavy* jsou odděleny jen malými energetickými intervaly ($\sim 10^{-3}$ eV), spektra, která vznikají při přechodech mezi těmito stavy, leží v mikrovlnné oblasti. *Vibrační stavy* jsou odděleny energetickými intervaly řádu 0,1 eV, vibrační spektra leží v infračervené oblasti ($\lambda \in \langle 10^{-6}, 10^{-4} \rangle$ m). *Elektronové stavy* molekuly mají vyšší energii s typickými vzdálenostmi sousedních hladin o velikosti několika eV, se spektry ve viditelné a ultrafialové oblasti. Z hlediska radičního přenosu energie je významná především ultrafialová a viditelná oblast spektra, tj. přechody mezi elektronovými stavy.

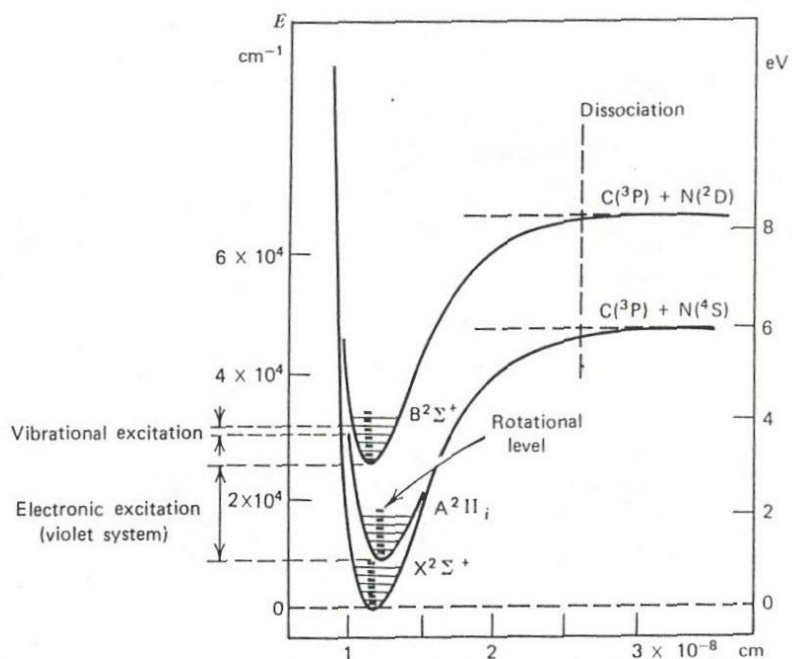


Obr. 3.5 Spektrální čáry molekuly plynu způsobené změnami její elektronové, vibrační a rotační energie [23].

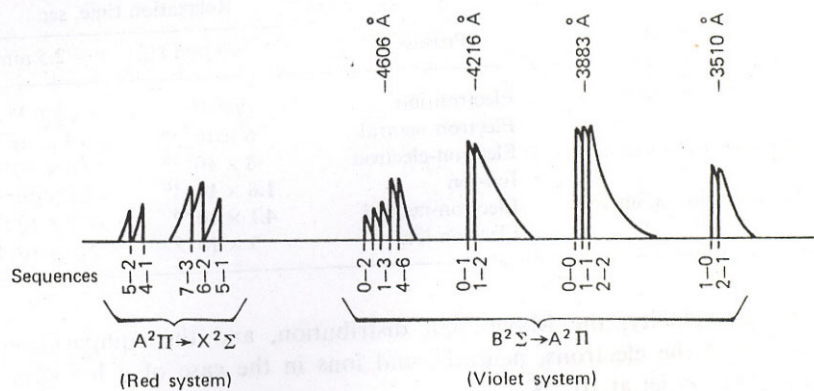
Celková energie molekuly (při zanedbání spinu a magnetické interakce) se skládá z potenciální a kinetické energie elektronů a z potenciální a kinetické energie jader. Pro pevná jádra závisí energie elektronů na mezijaderné vzdálenosti r . Součet energie elektronů a Coulombův potenciál jader tvoří potenciální energii vibračního pohybu jader – *efektivní potenciální energii*. Každý elektronový stav je charakterizován *potenciální křivkou*, která určuje závislost efektivní potenciální energie na vzdálenosti jader (obr. 3.6 $X^2\Sigma^+$, $A^2\Pi_g$, $B^2\Sigma^+$).

Pro daný elektronový stav mohou jádra vykonávat rotační a vibrační pohyb; pro každý elektronový stav existuje tedy řada vibračních a rotačních energetických hladin charakterizovaných vibračním (v) a rotačním (J) kvantovým číslem (obr. 3.6).

Pro elektronové přechody neexistují výběrová pravidla pro vibrační kvantová čísla, tj. jsou možné přechody mezi libovolnými vibračními hladinami horního a dolního elektronového stavu. Ve spektru vzniká velké množství velmi blízkých čar, které tvoří rotačně-vibrační pásy (obr. 3.7).



Obr. 3.6 Potenciální křivky dvouatomové molekuly CN s rotačně-vibrační strukturou [24].



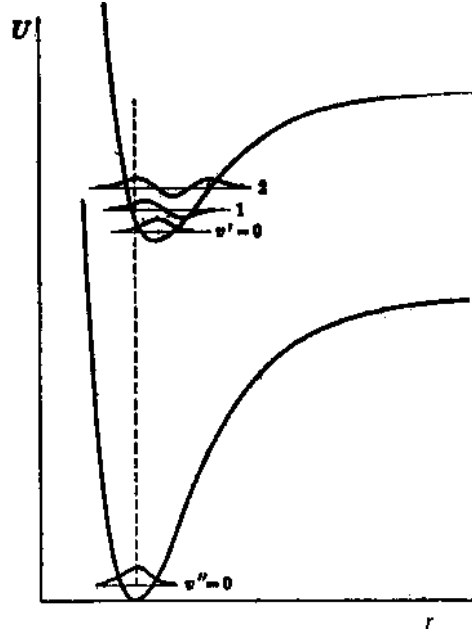
Obr. 3.7 Schematické spektrum molekuly CN [24]

Analýzu vibrační struktury pásů umožňuje *Franckův-Condonův princip*: Elektronové přechody probíhají tak rychle ve srovnání s vibračním pohybem jader, že okamžité mezijaderné vzdálenosti v molekule můžeme považovat během přechodu za neměnné (obr. 3.8)

Relativní intenzitu spektrálních čar v pásovém elektronově-vibračním spektru určují Franckovy-Condonovy faktory

$$\left| \int \psi_{v'} \psi_{v''} d\tau \right|^2 \equiv q_{v'v''}. \quad (3.22)$$

Zde $\psi_{v'}$, $\psi_{v''}$ jsou vibrační vlnové funkce počátečního a koncového elektronového stavu. Hodnoty Franckových-Condonových faktorů jsou pro řadu dvouatomových molekul tabelovány v [25].



Obr. 3.8 Franckův-Condonův princip [24].

V uvedeném příkladě je nejpravděpodobnější přechod z $v'' = 0$ na $v' = 2$.

Pro přibližné výpočty radiačních vlastností je vhodné zavést spektrální koeficient absorpce pro systém pásů středovaný nejen přes rotační strukturu, ale vyhlazený také částečně ve vibrační struktuře [26]

$$\bar{\kappa}_\nu = N\sigma(\nu, T) = N\pi r_0 \frac{\nu}{3R_\infty c} \frac{\bar{R}_e^2}{g''} \frac{1}{\Delta\omega} \sum_{v''v'} q_{v''v'} w_{v'} \quad (3.23)$$

N je koncentrace molekul, $w_{v''}$ je Boltzmannovská pravděpodobnost nalezení molekuly na vibrační hladině v'' . R_∞ je Rydbergova konstanta, \bar{R}_e označuje maticový element elektronového přechodu – jeho hodnoty pro některé elektronové přechody jsou tabelovány v [25]. V sumě (3.23) se sčítá přes všechny přechody $v'' \rightarrow v'$, pro které

$$\omega_{v'} - \omega_{v''} \equiv \omega_{v''v'} \in \left\langle \omega - \frac{\Delta\omega}{2}, \omega + \frac{\Delta\omega}{2} \right\rangle$$

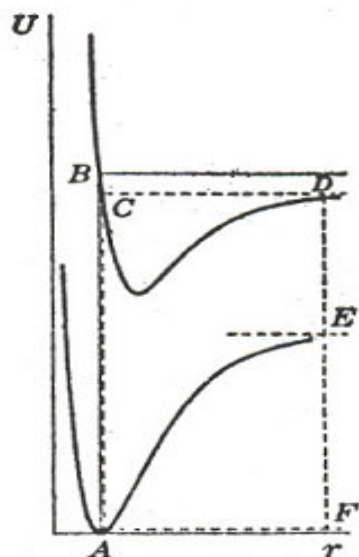
$\Delta\omega$ je interval středování v okolí $\omega = \frac{\nu}{c}$ pro příslušnou frekvenci ν absorbovaného fotonu.

Na volbě hodnoty $\Delta\omega$ závisí míra vyhlazení vibrační struktury.

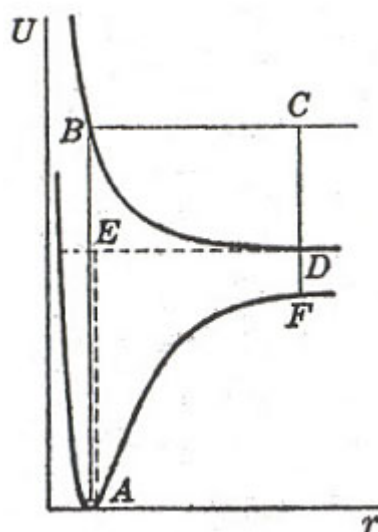
3.2.2 Spojité spektrum – fotodisociace molekul

Spojité spektrum vzniká při přechodu mezi dvěma stavy, z nichž alespoň jeden je charakterizován spojitými hodnotami energie. Pro atomy spojitá oblast navazuje na každou sérii diskretních elektronových stavů a odpovídá uvolnění elektronu (ionizaci), resp. zachycení volného elektronu iontem (rekombinaci).

Taková oblast spojitých energií je možná i pro molekuly. Kromě toho u molekul existuje ještě spojitá oblast spektra, která odpovídá rozpadu molekuly na atomové složky (normální nebo excitované atomy nebo kladné a záporné ionty) – *fotodisociace* (obr. 3.9). Podle Franckova-Condonova principu jsou nejpravděpodobnější absorpční přechody kolmo vzhůru z minima dolní potenciální křivky (přechody AB na obr. 3.9(a), 3.9(b)). Tento přechod dává maximum intenzity v absorpčním spektru.



Obr. 3.9 (a)



Obr. 3.9 (b)

Obr. 3.9 Potenciální křivky vysvětlující spojité absorpční spektrum[24].

Kvantitativní určení intenzity spočívá ve výpočtu maticových elementů dipólového přechodu. Intenzita pásu je podle Franckova-Condonova principu úměrná výrazu

$$\nu \left| \int \psi_{v'} \psi_{v''} d\tau \right|^2, \quad (3.24)$$

kde $\psi_{v'}$, $\psi_{v''}$ jsou vlastní funkce horního a dolního stavu molekuly. Tentýž vztah lze uplatnit i pro spojité fotoabsorpční spektrum, pro výpočet intenzity vztažené na jednotkový interval vlnových délek. Vlastní funkce dolního stavu je stejná jako v případě pásového spektra, pro horní stav je však třeba použít „odpudivou“ (repulsivní) vlastní funkci volného stavu ψ_E . Matematicky lze tuto funkci popsat pomocí *Airyho funkce* [27]. Překryvový integrál $\int \psi_{v'} \psi_E d\tau$ pro spojité spektrum se nazývá *Franckova-Condonova hustota*. Je integrálem ze součinu takové repulsivní vlastní funkce a vibrační vlastní funkce dolního vázaného stavu (Hermitův polynom). Příklad *repulsivních vlastních funkcí* je na obr. 3.10.

Absorpční koeficient pro disociativní přechod z vibrační hladiny v'' dolního vázaného stavu lze psát ve tvaru [28]

$$\kappa^{v''} = N_{v''} \sigma_{v''}, \quad (3.24)$$

kde $N_{v''}$ je hustota obsazení dolního vibračního termu a účinný průřez

$$\sigma_{v''} \sim \int \psi_{v'} \psi_E d\tau. \quad (3.25)$$

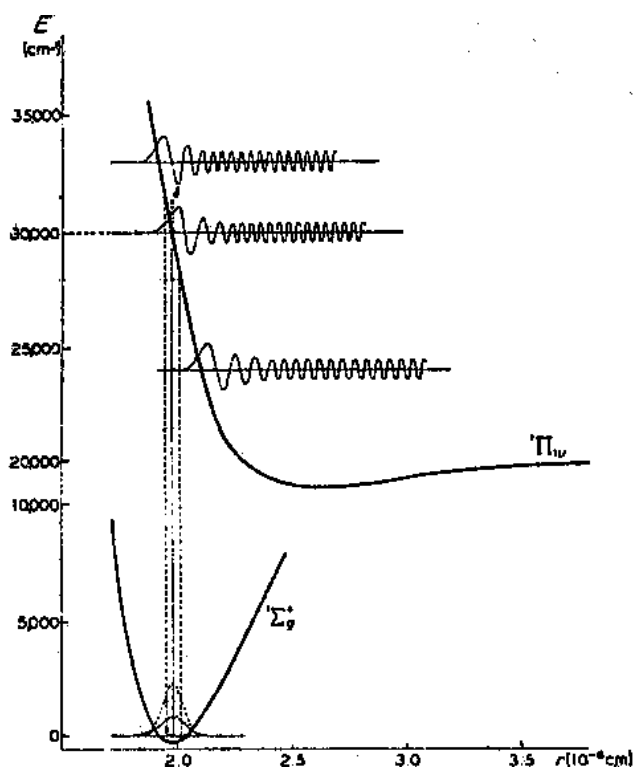
(přesný vztah je uveden v [28]).

Celkový spektrální koeficient absorpce získáme součtem přes vibrační hladiny dolního vázaného stavu

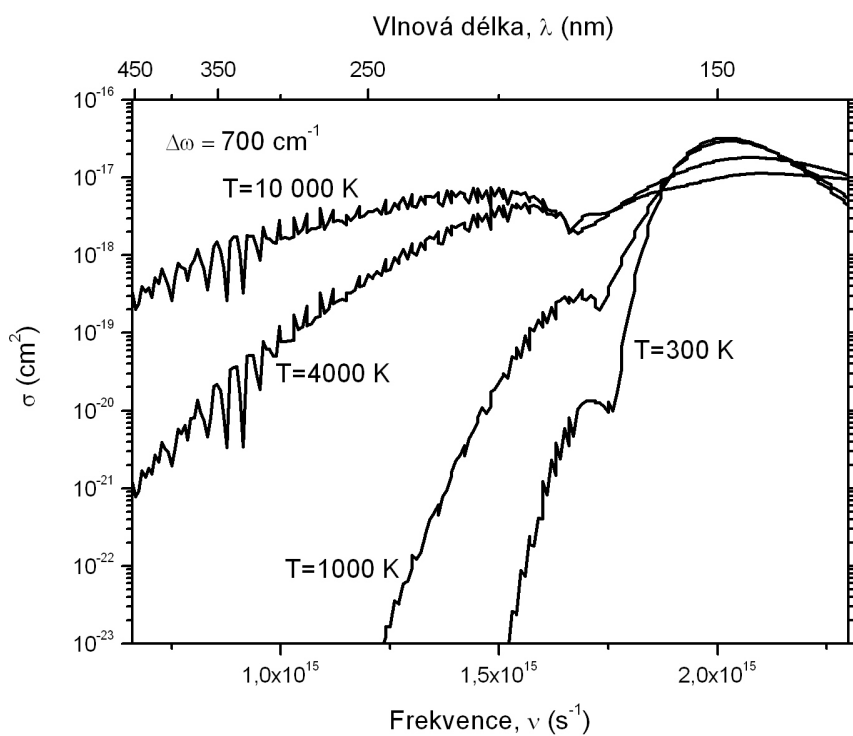
$$\kappa_{v'} = \sum_{v''} \kappa^{v''}. \quad (3.26)$$

Většinou stačí uvažovat jen několik nejnižších vibračních hladin.

Frekvenční závislost účinného průřezu fotoabsorpce molekuly O_2 pro Schumannův-Rungeův systém (pásky a kontinuum) pro teploty 300 K, 1 000 K, 4 000 K a 10 000 K je zobrazena na obr. 3.11.



Obr. 3.10 Potenciální křivky a repulsivní vlastní funkce pro molekulu Cl_2 [24].



Obr. 3.11 Frekvenční závislost účinného průřezu fotoabsorpce molekuly O_2 pro Schumannův-Rungeův systém (pásky a kontinuum) pro teploty 300 K, 1000 K, 4000 K, 10 000 K pro interval středování $\Delta\omega = 700 \text{ cm}^{-1}$.

4 NUMERICKÝ VÝPOČET KOEFICIENTŮ ABSORPCE

Cílem práce bylo vytvořit soubory vstupních dat a určit koeficient absorpce pro různá plazmová média vystupující ve spínacích vysokého napětí typu self-blast (směsi argonu a SF₆, směsi SF₆ s PTFE a příměsemi mědi) a v hybridních plazmatronech (směsi argonu a vodní páry).

Problematika týkající se čistého SF₆ byla zpracována již dříve v [14]. V předkládané práci byly vytvořeny soubory vstupních dat pro atomy a atomární ionty argonu, uhlíku, mědi, kyslíku a vodíku. Z molekulárních procesů byla zatím studována pouze fotoabsorpce a fotodisociace molekuly O₂ (Schumannovy-Rungeovy pásy).

Koeficient absorpce byl počítán programem [29]. Pro spojitě zářící bylo frekvenční interval 0,01·10¹⁵–30·10¹⁵ Hz rozdělen na 53 částí. V každé z těchto částí byl koeficient absorpce počítán v 500 bodech. Délka těchto podintervalů byla volena tak, že při konstantním kroku přes frekvenci nebyl krok přes vlnové délky nikdy větší než 7,5 nm. To zajišťuje dostatečnou přesnost při výpočtu koeficientu absorpce spojitě zářícího záření.

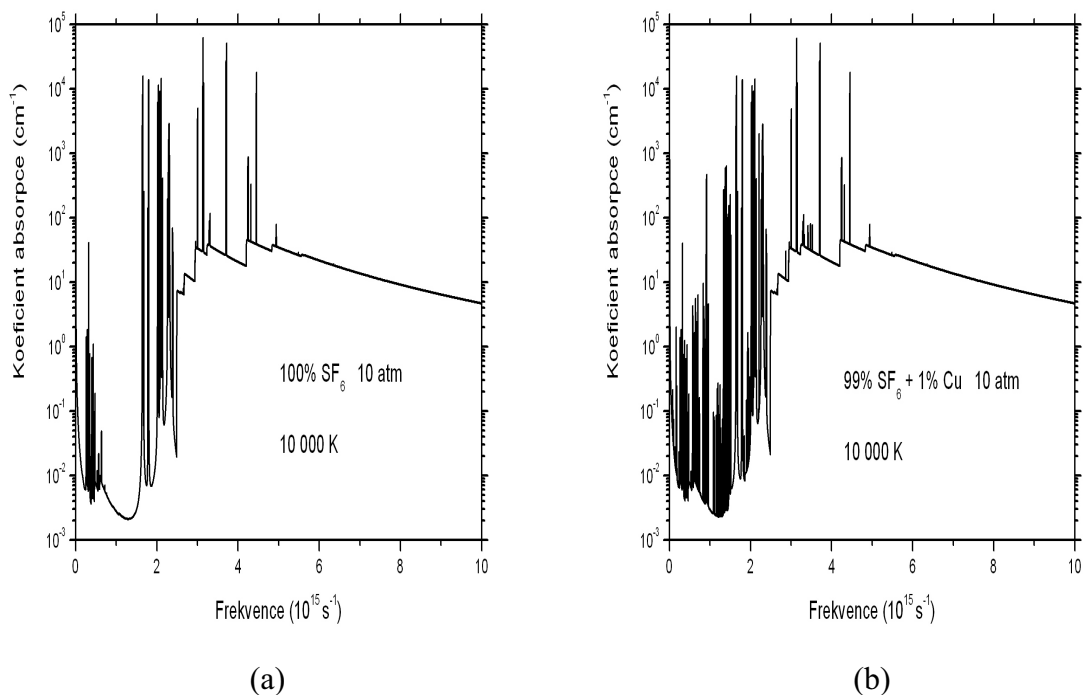
Koeficient absorpce čárového záření silně závisí na frekvenci. Proto byl frekvenční krok v každém z 53 podintervalů jemnější než v případě spojitě zářícího záření. Jeho velikost byla volena tak, aby při přepočtu na vlnovou délku nebyl nikdy větší než 0,075 nm. To je hodnota, při které je ještě možno rozlišit strukturu jednotlivých multiplétů. Pro každou frekvenci jednotlivých podintervalů se počítal příspěvek všech spektrálních čar, tím se do výpočtu zahrnulo i překrývání jednotlivých čar a multiplétů.

Celkový koeficient absorpce je dán součtem koeficientů absorpce spojitě a diskrétního záření. V bodech daných jemnějším dělením frekvenčního intervalu diskrétního záření byl koeficient absorpce spojitě zářícího počítán pomocí lineární interpolace.

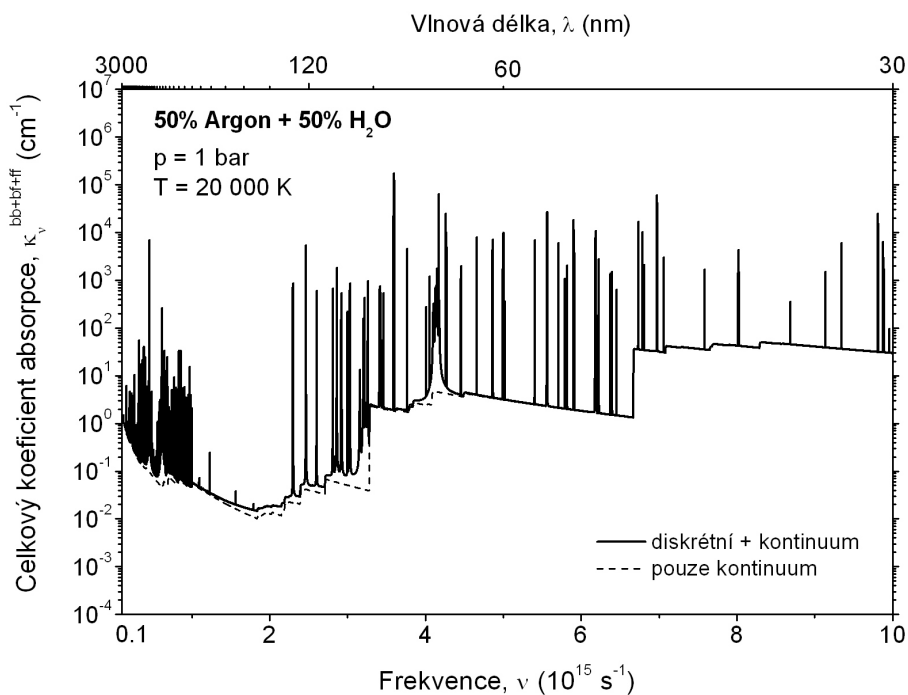
V aplikaci pro spínací oblouk byly spočítány koeficienty absorpce plazmatu SF₆ a PTFE (C₂F₄) pro teploty mezi 2 000–35 000 K a tlaky 0,1–5 MPa, pro směsi s procentuálním zastoupením $x\%$ SF₆ + (100 – x) % PTFE s $x = 0, 20, 25, 40, 50, 60, 75, 80, 100$. Pro teploty nižší než 2 000 K lze předpokládat výskyt PTFE v kapalném stavu, což v současné době nelze do výpočtu zahrnout. Ve složení plazmatu byly uvažovány pouze molekuly SF₆, atomy S, F, C, atomární ionty S⁺, S⁺², S⁺³, F⁺, F⁺², C⁺, C⁺², C⁺³ a elektrony. Koncentrace částic byly převzaty z [30]. Molekuly a vícenásobné ionty byly zanedbány vzhledem k jejich malému vlivu na výsledný přenos záření.

Vzhledem k tomu, že ve vypínači dochází při hoření oblouku k vypařování materiálu z elektrod, je nutné pro studium radiačních procesů znát i vliv kovových příměsí. Byly určeny koeficienty absorpce pro směsi SF₆ + Cu a PTFE + Cu pro teploty mezi 2 000 K a 30 000 K a tlaky 0,1 a 0,5 MPa s příměsí mědi 1 %, 5 % a 10 %. Příspěvek par Cu ke koeficientu absorpce plazmatu SF₆ ilustruje obr. 4.1.

V aplikaci pro hybridní plazmatrony byly uvažovány různé procentuální směsi H₂O a argonu, jejich koncentrace byly převzaty z [31]. Do výpočtu koeficientů absorpce byly zahrnuty neutrální atomy O, H, Ar, ionty O⁺, O⁺², Ar⁺, Ar⁺², Ar⁺³, Ar⁺⁴ a elektrony. Vliv molekuly O₂ (resp. H₂ a OH) nebyl ve výpočtu dosud respektován. Výpočty byly provedeny pro teploty 300–35 000 K a tlaky 0,1–1 MPa. Na obr. 4.2 je pro ilustraci výsledků zobrazen koeficient absorpce plazmatu směsi 50 % H₂O + 50 % Ar.



Obr. 4.1 Vliv příměsi Cu na koeficient absorpce plazmatu SF₆.
 (a) – koeficient absorpce čistého SF₆, (b) – koeficient absorpce směsi 99 % SF₆ + 1 % Cu.



Obr. 4.2 Koeficient absorpce spojitého a čárového záření směsi 50 % H₂O + 50 % Ar pro teplotu 20 000 K a tlak 1 bar [32].

5 ZÁVĚR

Hlavním cílem práce bylo vypracovat metodiku aproximativního výpočtu absorpčních koeficientů pro atomy a dvouatomové molekuly a na jejím základě připravit tabulky vstupních dat pro výpočet radiačních vlastností atomů C, Ar, H, O, Cu a jejich iontů a molekuly O₂. Na základě těchto parametrů a ze znalosti složení byly určeny koeficienty absorpce pro různé druhy plazmatu, v nichž jsou zastoupeny tyto látky – plazma PTFE, H₂O, Ar, směsi H₂O + Ar, PTFE + Cu, SF₆ + PTFE, SF₆ + Cu (vstupní parametry atomů S, F a jejich iontů byly připraveny již dříve [14]).

Znalost koeficientu absorpce je nezbytným předpokladem pro určení radiačních vlastností plazmatu a řešení přenosu energie zářením. Rovnice radiačního přenosu energie obsahuje integrály přes frekvenci a prostorové souřadnice; vzhledem k nelokální podstatě záření je její řešení velmi obtížné. Přesná integrace vyžaduje příliš mnoho strojového času, proto se při řešení využívají různé aproximativní metody. Mezi nimi hraje významnou roli metoda parciálních charakteristik, která umožňuje do výpočtů zahrnout reabsorpci záření emitovaného z horkých částí plazmatu, v jeho chladnějších oblastech. Metodou parciálních charakteristik a jejím využitím při řešení rovnic radiačního přenosu s aplikací na plazma elektrického oblouku se zabýváme v rámci řešení grantových projektů ve spolupráci s Ústavem výkonové elektrotechniky a elektroniky a Ústavem elektroenergetiky FEKT VUT v Brně.

Vstupní atomární a molekulární data a na jejich základě určené koeficienty absorpce jsou prvním krokem při výpočtu parciálních charakteristik plazmatu. Na základě výsledků prezentovaných v této práci byly vytvořeny tabulky parciálních charakteristik pro plazma PTFE, H₂O, Ar, směsi H₂O + Ar, PTFE + Cu, SF₆ + PTFE, SF₆ + Cu. Směsi byly voleny s ohledem na aplikaci v modelování fyzikálních procesů probíhajících v plazmatu elektrického oblouku ve vypínačích vysokého napětí a v hybridních plazmatronech. Charakteristiky záření byly zahrnuty do celkové energetické bilance elektrického oblouku, což umožnilo stanovit radiální průběhy teploty a volt-ampérové charakteristiky odpovídající skutečným poměrům v plazmatu elektrického oblouku. Vypočtené teploty a intenzity elektrického pole lze srovnat s experimentálně měřenými hodnotami [29].

Naše výsledky byly prezentovány na mnoha zahraničních konferencích, kde se setkaly se značným ohlasem. Na jejich základě byla navázána spolupráce s Ústavem fyziky plazmatu AV ČR v Praze a zahraničními pracovišti: RWTH Aachen (Německo), ABB Corporate Research (Švýcarsko), Siemens AG (Německo) a KERI (Korea). Z těchto pracovišť, která se zabývají modelováním fyzikálních procesů a konstrukcí hybridních plazmatronů (Ústav fyziky plazmatu) a výkonových vypínačů (ABB, Siemens, KERI), přicházejí také požadavky na rozšíření oblastí zkoumání z původního plazmatu SF₆ a argonu na směsi s PTFE, Cu, plazma H₂O, vzduchu aj.

Dosažené výsledky mají velké uplatnění při studiu radiačních vlastností plazmatických médií a v modelování fyzikálních procesů probíhajících v elektrickém oblouku. Ačkoliv jsou teoretické povahy, jsou nepřímo experimentálně ověřovány na základě srovnání teoreticky spočítaných parametrů elektrického oblouku s experimentálně měřenými hodnotami.

Cíle pro další práci: Z experimentálních výsledků plyne, že při modelování je velikost vyzářené energie mírně podhodnocena, protože teoretické hodnoty teploty vychází vyšší než měřené. Chyba je zřejmě způsobena zanedbáním vlivu absorpce molekul v chladnějších oblastech plazmatu. V předkládané práci je naznačen postup zjednodušeného výpočtu molekulárních účinných průřezů fotoabsorpce, zatím pouze pro molekulu O₂. Jedním z cílů pro další práci je proto podrobné studium molekulárních procesů a jejich zahrnutí do výpočtu celkového koeficientu absorpce plazmatu a parciálních charakteristik. Na základě požadavků našich partnerů zabývajících se konstrukcí spínacích přístrojů řešíme v současné době výpočty absorpčních koeficientů plazmatu vzduchu, plánuje se rozšíření výpočtů o další kovové příměsi elektrodových materiálů.

LITERATURA

- [1] Boulos Maher, I. – Fauchais, P. – Pfender, E.: *Thermal Plasma. Fundamentals and Applications*. Vol. I. New York: Plenum Press, 1994.
- [2] Březina, V. – Hrabovský, M. – Konrád, M. – Kopecký, V. – Sember, V.: „New plasma spraying torch with combined gas-liquid stabilization of arc“ in *Proc. 15th Int. Symp. on Plasma Chemistry*, vol. III (A.Bouchoule at all, ed.), (Orleans, Francie), pp. 1021–1026 (2001).
- [3] Claessenes, M. – Starck, R. – von Thiel, H. G.: „Simulation of Gas Flow Phenomena in High-Voltage Self-Blast Circuit Breakers at Heavy Fault Current Interruption“, *IEEE Trans. on Plasma Science*, vol. 25 (1997), pp. 1001–1009.
- [4] Knobloch, H. – de Hesselle, M. – Moeller, K.: „Technological Trends in High-Voltage Circuit Breakers“, *CIGRE 2000 Session Papers Group Switching Equipment*.
- [5] Sevast'yanenko, V. G.: „Radiation transfer in a real spektrum. Integration over frequency“, *J. Eng. Phys.*, vol. 36 (1979), pp. 138–148.
- [6] Soloukhin, R. I.: *Radiative Heat Transfer in High-Temperature Gases*. London: Hemisphere, 1980.
- [7] Aubrecht, V. – Lowke, J. J.: „Calculations of radiation transfer in SF₆ plasmas using the method of partial characteristics“, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, vol. 27 (1994), pp. 2066–2073.
- [8] Aubrecht, V. – Bartlová, M.: „Calculations of radiative heat transfer in SF₆ arc plasma“, *IEEE Transactions on Plasma Science*, vol. 25 (1997), pp. 815–823.
- [9] <http://cfa-www.harvard.edu/amdata/ampdata>.
- [10] <http://www.pa.uky.edu/~verner/stark.html>.
- [11] <http://cfa-www.harvard.edu/HITRAN>.
- [12] <http://physics.nist.gov/cgi-bin/AtData>.
- [13] Gross, B.: *Elektrické přístroje II*. VUT v Brně, 1980.
- [14] Aubrecht, V.: *Záření plazmatu spínacího oblouku v SF₆*. PhD thesis, VUT v Brně, 1991.
- [15] Penner, S. S.: *Quantitative Molecular Spectroscopy and Gas Emissivities*. London-Paris: Pergamon Press, 1959.
- [16] Liebermann, R. W. – Lowke, J. J.: „Radiation emission coefficients for sulphur hexafluoride arc plasma“, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, vol. 16 (1976), pp. 253–264.
- [17] Sobelmann, I. I.: *Vvedeniye v teoriju atomnykh spektrov*. Moskva: Nauka, 1977.
- [18] Burgess, A. – Seaton, M.: *J. Monthly Not. Roy. Astr. Soc.*, vol. 20 (1960), p. 21.
- [19] Griem, H. R.: *Plasma Spectroscopy*. New York: McGraw-Hill Book Company, 1964.
- [20] Aubrecht, V. – Bartlová, M.: „Radiation in SF₆ + PTFE arc plasmas“, in *Proc. XIVth Int. Conf. on Gas Discharges and their Appl.*, vol. I (Liverpool, UK), pp. 47–49, (2002).
- [21] Wiese, W. L. – Smith, M. W.: *Atomic Transition Probabilities*, NSRDS NBS 22, Vol. 2, NSRDS NBS 4, Vol. 1. Washington: NBS, 1966–1969.
- [22] Aubrecht, V. – Bartlová, M.: „Radiation absorption coefficients in arc plasmas“, *Czech J. of Physics*, vol. 54, Suppl. C (2004), pp. C759–C765.
- [23] Modest, M. F.: *Radiative Heat Transfer*. New York: McGraw-Hill, Inc.

- [24] Herzberg, G.: *Molecular Spectra and Molecular Structure. I. Spectra of Diatomic Molecules*. New York: D. Van Nostrand Co., 1950.
- [25] Kuzmenko, N. E. – Kuznecova, L. A. – Kuzjakov, J. J.: *Faktory Franka-Kondona dvuchatomnykh molekul*. Moskva: Izd. Moskovskogo universiteta, 1984.
- [26] Biberman, L. M. – Mnacakanjan, A. Ch.: „Optičeskije svojstva vozducha v intervale temperatur 4 000–10 000 K“, *Teplofizika vysokich temperatur*, vol. 4 (1966), pp. 148–159.
- [27] Landau, L. D. – Lifschitz, E. M.: *Lehrbuch der Theoretischen Physik. Band III. Quantenmechanik*. Berlin: Akademie Verlag, 1979.
- [28] Penner, S. S. – Olfe, D. B.: *Radiation and Reentry*. New York, London:Academia Press, 1968.
- [29] Aubrecht, V.: *Radiační transport energie v plazmatu elektrického oblouku*. Habilitační práce, VUT v Brně, 1998.
- [30] Coufal, O.: *Acta Technica ČSAV*, vol. 37 (1992), p. 209.
- [31] Jeništa, J.: soukromé sdělení.
- [32] Bartlová, M.: „Absorption of Radiation in SF₆, Ar and H₂O Arc Plasma“, in *Proc. 22nd Int. Symp. on the Physics of Ionized Gases* (L.Hadžievski, ed.), (Tara, Srbsko a Černá Hora), pp. 425–428 (2004).

ABSTRACT

Radiative transport of energy plays an important role in many plasma processing devices, namely for production of surfaces with specific properties, for synthesis of materials, waste treatment and plasma metallurgy. Jets of thermal plasma are produced in plasma generators with electric arcs. Common arc plasma generators (plasmotrons) operate with electric arc stabilized by a gas flow, usually argon, nitrogen or mixtures of these gases with hydrogen or helium. Mixture of argon and H₂O vapour is also used in hybrid plasma jets with liquid and gas stabilisation.

Electrical arcs in high power circuit breakers are other important application of thermal plasmas. The radiation transfer itself is the dominant energy exchange mechanism during the high current period of the switching operation. The recently introduced circuit breaker in the mid and high voltage region is the SF₆ self-blast circuit breaker. The switching arc or plasma is ignited inside a narrow nozzle of synthetic material, PTFE (Polytetrafluorethylene). Due to high emission of radiation from the arc, the synthetic material ablates and causes a high overpressure inside the nozzle and drives the gas flow in the circuit breaker.

Gaining information or even predicting the physical processes occurring during a switching operation by means of measurement is hardly impossible due to the high pressures and temperatures inside the nozzle. The CFD (Computational Fluid Dynamics) calculation of the physical processes occurring during a switching operation of high currents in SF₆ self-blast circuit breakers has been well established during the last years and has found to be a highly valuable tool for research and industrial development. Detailed information about the local arc structure can only be given by radiation models, which allow the calculation of the distribution of emission and absorption throughout the complete computational domain.

The experimental observation of radiation transfer is very difficult due to experimental conditions such as high temperature, pressure and velocity of the gas, etc. In such cases, the mathematical modelling is of great importance. However, the non-linearity of equations describing the radiation field and strong dependency of input parameters on the radiative frequency and properties of the medium make mathematical plasma models very complicated, their exact solution is practically impossible. Several approximate methods have been described; one of them is the method of partial characteristics which enables to account for the effects of radiation transfer due to the absorption at the edge of the arc of radiation emitted from the centre of the arc. By means of this method, it is possible to separate the time consuming computation of the radiation field from the dynamics equations. Spectral absorptivities are pre-calculated and tables of two special functions – partial characteristics - are prepared. The calculation of the energy balance of the plasma consists in computational searching in pre-calculated tables and the spatial integration of these functions over all solid angles. Pre-calculated data of partial characteristics enable to solve the radiation transfer not only for simple symmetry, but also for any arbitrary plasma geometry.

The preliminary task for computation of partial characteristics is the knowledge of absorption coefficients of the plasma. This thesis are devoted to preparation and/or collection of atomic and molecular data (radiative cross sections of photo-ionization, photo-dissociation and bremsstrahlung, spectral line broadening and shift, oscillator strengths, transition probabilities, intensities of molecular bands, Franck-Condon factors of molecular electronic transitions etc.), which will serve as input for calculation of absorption coefficients. This work is very time demanding, it requires searching for data in available databases and literature on either Internet or libraries. If there is lack of relevant data, it has to be theoretically predicted.

The thesis is of theoretical nature. The main task was to prepare the approximate methods of the calculation of absorption coefficients of atoms and diatomic molecules, to verify the reliability of results as compared with available data in literature and on Internet, to extend these data to required frequencies and temperatures, and to prepare input data for calculation of partial characteristics of plasmas SF₆, PTFE, Cu, Ar, H₂O and their mixtures.