

应的速率常数单位为 $\text{cm}^6/(\text{molecules}^2 \cdot \text{s}^2)$.

表 1 模型中所考虑的主要反应
Tab. 1 The main reactions in the model

序号	反应	$K/(\text{s}^{-1};$
		$\text{cm}^3/(\text{molecules} \cdot \text{s});$ $\text{cm}^6/(\text{molecules}^2 \cdot \text{s}^2))$
1	$\text{e} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+) + \text{H} + \text{e}$	$7.85 \times 10^{-13} (f(E/N))$
2	$\text{e} + \text{OH}(\text{X}^2\Pi) \rightarrow \text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+) + \text{e}$	$1.0 \times 10^{-8} (f(E/N))$
3	$\text{He}^+ + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+) + \text{H} + \text{He}$	$4.8 \times 10^{-10} [13]$
4	$\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+) + \text{He} \rightarrow \text{OH}(\text{X}^2\Pi) + \text{He}$	$8.8 \times 10^{-14} [13]$
5	$\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+) + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH}(\text{X}^2\Pi) + \text{H}_2\text{O}$	$5.9 \times 10^{-10} [6]$
6	$\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+) \rightarrow \text{OH}(\text{X}^2\Pi) + h\nu$	$1.4 \times 10^{-6} [6]$
7	$\text{e} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}^- + \text{OH}(\text{X}^2\Pi)$	$1.31 \times 10^{-12} (f(E/N))$
8	$\text{e} + \text{O}_2 \rightarrow \text{e} + \text{O} + \text{O}$	$1.12 \times 10^{-11} (f(E/N))$
9	$\text{e} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{e} + \text{O}(^1\text{D}) + \text{H}_2$	$8.23 \times 10^{-11} (f(E/N))$
10	$\text{O} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow 2\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$	$2.36 \times 10^{-12} [15]$
11	$\text{O} + \text{OH}(\text{X}^2\Pi) \rightarrow \text{O}_2 + \text{H}$	$3.29 \times 10^{-11} [15]$
12	$\text{O}(^1\text{D}) + \text{O}_2 \rightarrow \text{O} + \text{O}_2(\text{b})$	$3.11 \times 10^{-11} [12]$
13	$\text{O}(^1\text{D}) + \text{O}_3 \rightarrow \text{O}_2 + \text{O} + \text{O}$	$1.2 \times 10^{-10} [12]$
14	$\text{O}(^1\text{D}) + \text{O}_3 \rightarrow \text{O}_2(\text{a}) + \text{O}_2$	$1.5 \times 10^{-11} [12]$
15	$\text{O}(^1\text{D}) + \text{H}_2\text{O} \rightarrow 2\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$	$2.3 \times 10^{-10} [18]$
16	$\text{O}(^1\text{D}) + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2 + \text{O}_2$	$2.3 \times 10^{-12} [15]$
17	$\text{O}_2(\text{a}) + \text{HO}_2 \rightarrow \text{OH}(\text{X}^2\Pi) + \text{O} + \text{O}_2$	$1.66 \times 10^{-11} [16]$
18	$\text{O}_2(\text{b}) + \text{O} \rightarrow \text{O}_2(\text{a}) + \text{O}$	$8 \times 10^{-14} [15]$
19	$\text{O}_2(\text{b}) + \text{O}_3 \rightarrow \text{O}_2 + \text{O}_2 + \text{O}$	$1.5 \times 10^{-11} [17]$
20	$\text{O}_2(\text{b}) + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O}$	$4.0 \times 10^{-12} [15]$
21	$\text{O}_3 + \text{H} \rightarrow \text{OH}(\text{X}^2\Pi) + \text{O}_2$	$7.5 \times 10^{-13} [17]$
22	$\text{OH}(\text{X}^2\Pi) + \text{HO}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	$6.2 \times 10^{-11} [16]$
23	$\text{OH}(\text{X}^2\Pi) + \text{OH}(\text{X}^2\Pi) \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	$2.32 \times 10^{-12} [15]$
24	$\text{O} + \text{H}_2 \rightarrow \text{OH}(\text{X}^2\Pi) + \text{H}$	$2.63 \times 10^{-17} [14]$
25	$\text{O}(^1\text{D}) + \text{O}_2 \rightarrow \text{O} + \text{O}_2(\text{a})$	$2.0 \times 10^{-12} [15]$
26	$\text{O}_2(\text{b}) + \text{O}_3 \rightarrow \text{O}_2(\text{a}) + \text{O}_2 + \text{O}$	$7.7 \times 10^{-12} [15]$
27	$\text{e} + \text{O}_2 \rightarrow \text{e} + \text{O}(^1\text{D}) + \text{O}$	$3.36 \times 10^{-11} (f(E/N))$
28	$\text{O}(^1\text{D}) + \text{H}_2 \rightarrow \text{H} + \text{OH}(\text{X}^2\Pi)$	$1.0 \times 10^{-10} [13]$
29	$\text{e} + \text{O}_2 \rightarrow \text{O}_2^+ + 2\text{e}$	$5.1 \times 10^{-8} (f(E/N))$
30	$\text{e} + \text{O} \rightarrow 2\text{e} + \text{O}^+$	$3.64 \times 10^{-8} (f(E/N))$
31	$\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+) + \text{M} \rightarrow \text{OH}(\text{X}^2\Pi) + \text{M}$	$1.4 \times 10^{-10} [13]$
32	$\text{e} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH}(\text{X}^2\Pi) + \text{H} + \text{e}$	$7.02 \times 10^{-12} (f(E/N))$
33	$\text{He}^+ + \text{He}^+ \rightarrow \text{e} + \text{He} + \text{He}^+$	$2.0 \times 10^{-9} [13]$
34	$\text{OH}(\text{X}^2\Pi) + \text{OH}(\text{X}^2\Pi) \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2$	$1.65 \times 10^{-13} [13]$

1.2 模拟模型

本模型中速率方程形式如下：

$$\frac{dn_i}{dt} = \sum -k_{ij}n_in_j + \sum k_{pq}(\rightarrow n_i)n_pn_q \quad (1)$$

式中： n_i 和 n_j 为物种*i*消耗反应中*i*和*j*物种的浓度； n_p 和 n_q 为物种*i*生成反应中*p*和*q*物种的浓度； k_{ij} 和 k_{pq} 分别为物种*i*消耗和生成反应的速率常数。

对所考虑反应体系中基元反应涉及到的每一物种均列一个相应的速率方程式，归结为相关物

种浓度关联耦合的一阶常微分方程组初值问题，研究各物种浓度在时间上的演化规律，由此可以建立化学反应动力学微分方程组，采用特雷纳法对其求解^[19]。

1.3 计算流程图

理论模型的计算流程如图 1 所示。

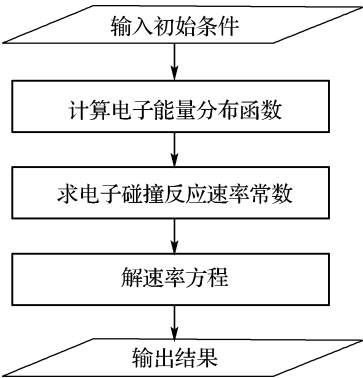


图 1 计算流程图

Fig. 1 Flow chart for calculation

2 模拟结果分析讨论

2.1 初始条件和参数选取

所模拟的初始气体条件如下： $\text{H}_2\text{O}/\text{He}$ 体系中，气压 $1.013 \times 10^5 \text{ Pa}$ （0.48% H_2O + 其余 He ），放电峰-峰电压 9.2 kV，放电频率 70 kHz，放电间隙 8 mm， $E/N = 2.3 \times 10^{-16} \text{ V} \cdot \text{cm}^2$ （由放电电压和放电间隙计算得到）。为了简化计算，在介质阻挡放电中，每半个周期中的微放电过程近似为一个较宽的脉冲。

2.1.1 电子能量分布函数 在稳定电场作用下，由于电子的碰撞伙伴是分子，其质量比 $m_e/M < 10^{-4}$ ，忽略了电子与分子的弹性碰撞，超弹性碰撞也不做考虑，电子的 Boltzmann 方程可表示为^[20,21]

$$\frac{1}{3} \left(\frac{E}{N} \right)^2 \frac{d}{du} \left(\frac{u}{Q_s} \frac{df}{du} \right) + \sum_s \sum_j M_{sj} [(u + u_{sj}) f(u + u_{sj}) Q_{sj}(u + u_{sj}) - u f(u) Q_{sj}(u)] = 0$$

归一化条件

$$\int_0^\infty u^{1/2} f(u) du = 1 \quad (2)$$

式中： E 是电场强度； u 是电子能量； f 是电子能量分布函数； N 是粒子数总密度； M_{sj} 是物种 s 的数密度百分比； Q_{sj} 是物种 s 与电子碰撞被激发到激

发态 j 的非弹性碰撞截面; u_{sj} 是非弹性碰撞的能量损失. 方程第 1 项表示电场对电子的作用项, 第 2 项表示电子与其他粒子的非弹性碰撞.

将 Boltzmann 方程离散变量构成一差分方程组写成含未知数的线性代数方程组, 得到的是一个三对角形方程组, 用追赶法^[22] 对其进行求解. 用 FORTRAN 语言编写程序, 得到电子能量分布函数. $\text{H}_2\text{O}/\text{He}$ 体系的电子能量分布函数如图 2 所示.

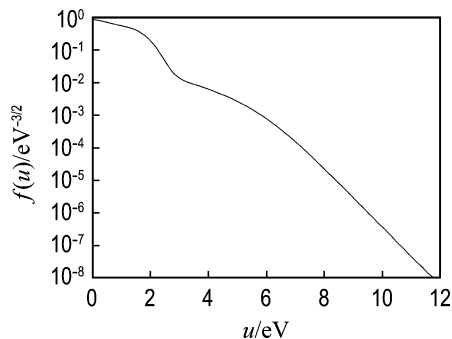


图 2 $\text{H}_2\text{O}/\text{He}$ 体系的电子能量分布函数

Fig. 2 Electron energy distribution function of $\text{H}_2\text{O}/\text{He}$

2.1.2 速率常数的计算 把得到的电子能量分布函数代入下式:

$$k = \int_0^{\infty} (u/2m)^{1/2} Q(u) f(u) du \quad (3)$$

可以得到所需要的电子碰撞反应速率常数. 式中 k 为反应的速率常数, Q 为反应的碰撞截面, $f(u)$ 为电子能量分布函数. 计算中的截面数据来自文献[23~25].

2.2 结果与讨论

2.2.1 $\text{H}_2\text{O}/\text{He}$ 体系中 OH 自由基浓度随时间的变化 图 3 描述了在 $\text{H}_2\text{O}/\text{He}$ 体系中 $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ 、 $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+)$ 和电子的浓度 D 随时间的变化, 三者的浓度都随时间先增大后减小, $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ 的最大浓度为 3.36×10^{13} molecules $\cdot \text{cm}^{-3}$, $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+)$ 的最大浓度为 7.59×10^{12} molecules $\cdot \text{cm}^{-3}$, 电子的最大浓度为 6.02×10^{13} molecules $\cdot \text{cm}^{-3}$. 从图中可以看出, 放电脉冲结束, 电子浓度减小之后, 随之 $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+)$ 浓度开始减小, 因为 $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+)$ 主要由反应



而产生. 电子浓度减小, 必然引起 $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+)$ 浓度减小. 但此时 $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ 的浓度仍在增加, 直到 $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+)$ 的浓度下降到一定值, 这时

$\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ 的浓度才开始减小. 虽然由反应



得到由于电子浓度减小, 电子直接碰撞解离得到的 $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ 的浓度会下降, 但因为有如下反应:

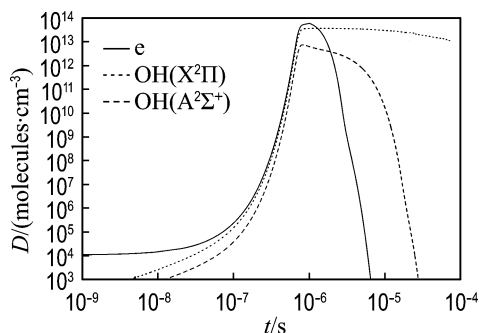
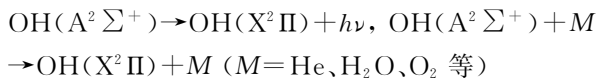


图 3 单脉冲 $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ 、 $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+)$ 自由基和电子的浓度随时间的变化

Fig. 3 Density evolution of $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$, $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+)$ and electron with time in a pulse

所以, $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ 的浓度仍在增大, 直到 $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+)$ 的浓度下降到一定值, 这时 $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ 的浓度才开始减小.

图 4 模拟了几个脉冲下, $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ 、 $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+)$ 和电子的浓度随时间的变化. 可见在前几个放电脉冲, 活性物种随时间的变化是不稳定的, 各个物种的浓度是在增大的. 因为在前一个脉冲产生的活性物种, 在下一个脉冲开始时仍然存在, 并且会影响下一个脉冲时物种的浓度变化, 所以在前几个脉冲活性物种不稳定, 浓度增大. 但在随后的几个脉冲中, 活性物种达到一个平衡, 随时间的变化基本稳定. 由图 4 可以得到, 在模拟条件下, $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ 的浓度达到稳定后的时间平均值为 8.32×10^{13} molecules $\cdot \text{cm}^{-3}$, $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+)$ 的浓度达到稳定后的时间平均值为 9.40×10^{11} molecules $\cdot \text{cm}^{-3}$, e 的浓度达到稳定后的时间平均值为 2.56×10^{12} molecules $\cdot \text{cm}^{-3}$. 在考察 $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ 、 $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+)$ 自由基的浓度随 O_2 和 H_2O 含量的变化时, 均取在不同组分时 $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ 、 $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+)$ 浓度的时间平均值.

2.2.2 $\text{H}_2\text{O}/\text{He}$ 体系中 OH 自由基浓度随水含量的变化 从图 5 可以看出, $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ 和 $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+)$ 的浓度分别随水含量的增加先增大后减小. 引起上述变化的主要原因分析如下:

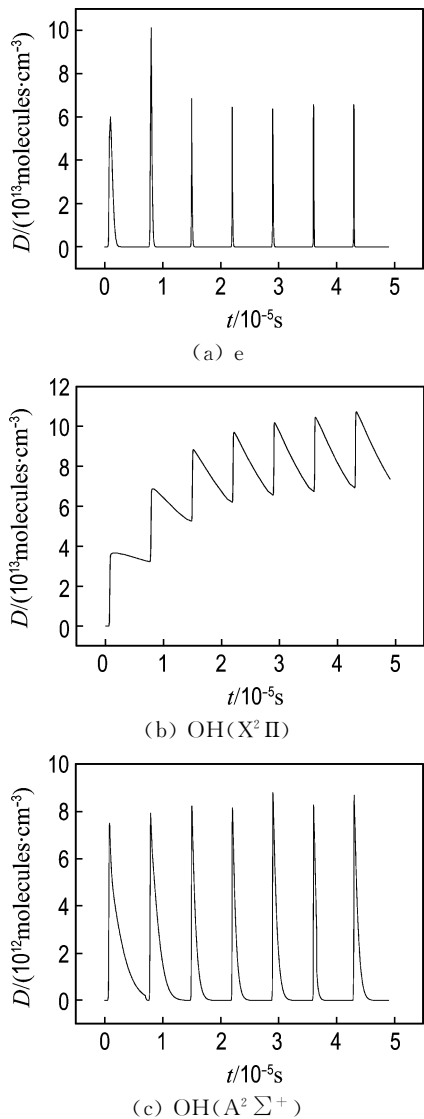


图 4 多个脉冲 OH(X²Π)、OH(A²Σ⁺) 自由基和电子的浓度随时间的变化

Fig. 4 Density evolution of OH(X²Π), OH(A²Σ⁺) and electron with time in pulses

一方面高能电子与 H₂O 的直接碰撞生成 OH(X²Π) 和 OH(A²Σ⁺)， $e + H_2O \rightarrow OH(A^2\Sigma^+) + H + e$ ， $e + H_2O \rightarrow OH(X^2\Pi) + H + e$ ， $OH(A^2\Sigma^+) \rightarrow OH(X^2\Pi) + h\nu$

水含量的增多则必然引起 OH(X²Π)、OH(A²Σ⁺) 的增多，并且生成的 OH(A²Σ⁺) 在很短的时间回到 OH(X²Π)，从而也使得 OH(X²Π) 增多。

另一方面，高能电子与 H₂O 的直接碰撞导致 O(¹D) 增多，如图 5 所示，



在水蒸气含量较多的条件下，O(¹D) 与 H₂O 继续反应生成大量的 OH(X²Π)。

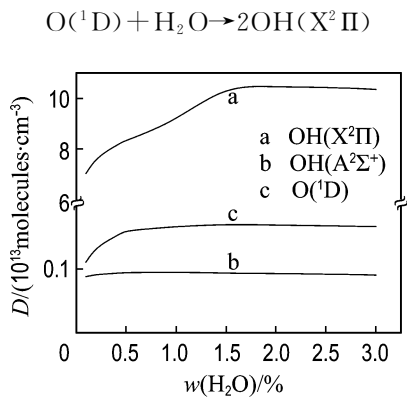


图 5 OH(X²Π)、OH(A²Σ⁺) 等活性物种浓度随水含量的变化曲线

Fig. 5 Density evolution of OH(X²Π), OH(A²Σ⁺) and other radicals as a function of water concentration

但是介质阻挡放电是由无数的随意分布的丝状微放电组成的，通过对放电电场的测定得到，H₂O 含量的增加，使微放电的数目减少，所以在 H₂O 含量为 2% 左右时，OH(X²Π)、OH(A²Σ⁺)、O(¹D) 的浓度都略有下降。

2.2.3 H₂O/He 体系中 OH 浓度随加入 O₂ 含量的变化 在 H₂O/He 体系中，加入氧气，使氧气含量在 0 ~ 2% 变化，从图 6 中可看到 OH(X²Π)、OH(A²Σ⁺) 的浓度随氧气含量的增大先增大后减小。

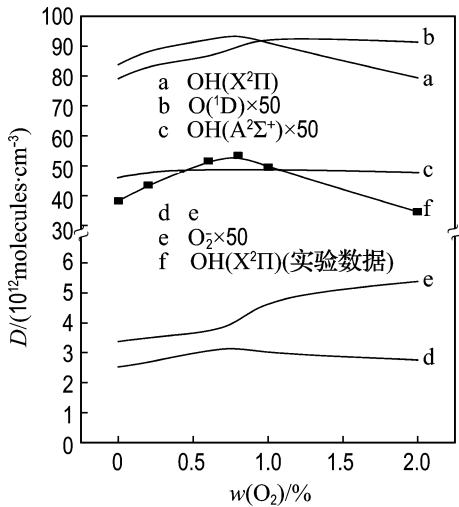
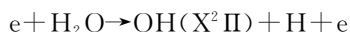


图 6 OH(X²Π)、OH(A²Σ⁺) 等活性物种浓度随氧气含量的变化曲线

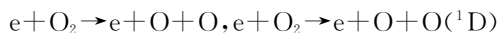
Fig. 6 Density evolution of OH(X²Π), OH(A²Σ⁺) and other radicals as a function of oxygen concentration

浓度变化的主要原因分析如下：
加入氧气后，电子与 O₂ 分子发生碰撞，虽然

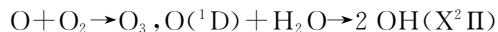
与水碰撞的电子变少,由反应



得到的 $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ 减少了,但在加入氧气时,电子与氧气碰撞,发生以下反应生成基态 O 原子和亚稳态的 $\text{O}(\text{D})$,

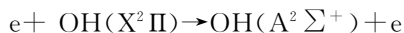


氧气增加时,电子直接碰撞会产生大量的 O 原子和 $\text{O}(\text{D})$ (如图 5 所示),放电产生的 O 原子还会进一步和 O_2 反应生成 O_3 分子,同时 $\text{O}(\text{D})$ 和 H_2O 会进一步发生反应,具体如下:



所以 $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ 的浓度有所增加。

然而由于氧气是电负性气体,具有较大的电子附着截面,大量的自由电子被 O_2 分子吸附而形成 O_2^- ,随着氧气含量的增加自由电子密度减小,使得电子与水直接碰撞产生的 $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ 的浓度减小,同时添加氧气后放电产生的大量 O 原子和 O_3 分子与 $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ 发生反应,从而消耗了大量的 $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$,因此继续添加氧气后 $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ 的浓度又会减小,因为反应



所以,随着氧气含量的增加, $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+)$ 的浓度也出现了先增大后减小的趋势。

将 $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ 随氧气含量变化的模拟计算值与实验值进行了对比,发现二者的趋势基本吻合,可见计算的正确性。由此也可以证明对于 $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ 的产生机理和对 $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ 随氧气含量的变化趋势的解释是正确的。

3 结 论

通过数值模拟得到了介质阻挡放电时, $\text{H}_2\text{O}/\text{He}$ 体系中电子、 $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ 和 $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+)$ 的浓度随时间的演变情况,发现 $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ 、 $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+)$ 的浓度随 H_2O 含量的增加先增大后减小。而当在体系中加入氧气时, $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ 、 $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+)$ 的浓度随氧气含量的增加同样呈现先增大后减小的趋势。

参考文献:

- [1] ELLASSON B, KOGELSCHATZ U. Modeling and applications of silent discharge plasma [J]. **IEEE Transactions on Plasma Science**, 1991, **19**(1):309-323
- [2] MÜLLER I, PUNSET C, AMMELT E, *et al.*

Self-organized filaments in dielectric barrier glow discharges [J]. **IEEE Transactions on Plasma Science**, 1999, **27**(1):20-21

- [3] RAIZER Y P. **Gas Discharge Physics** [M]. Heidelberg:Springer, 1991
- [4] KOGELSCHATZ U. Silent discharges for the generation of ultraviolet and vacuum ultraviolet excimer radiation [J]. **Pure and Applied Chemistry**, 1990, **62**(9):1667-1674
- [5] 孙 明, 吴 彦, 李 杰, 等. 低温等离子体烟气脱硫中 OH 自由基发生装置研究 [J]. 大连理工大学学报, 2004, **44**(1):26-30
(SUN Ming, WU Yan, LI Jie, *et al.* Study of apparatus producing OH radicals for desulfuration from flue gas by non-thermal plasma [J]. **Journal of Dalian University of Technology**, 2004, **44**(1):26-30)
- [6] GERBER T, IÜTHY W. The formation of $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+)$ from H_2O in a longitudinal discharge [J]. **Journal of Chemical Physics**, 1983, **79**(11):5445-5447
- [7] SUN B, SATO M, CLEMENTS J S. Optical study of active species produced by a pulsed streamer [J]. **Journal of Electrostatics**, 1997, **39**(3):189-202
- [8] ERSHOV A, BORYSOW J. Dynamics of $\text{OH}(\text{X}^2\Pi, v=0)$ in high-energy atmospheric pressure electrical pulsed discharge [J]. **Journal of Physics D:Applied Physics**, 1995, **28**(1):68-74
- [9] SANKARANARAYANAN R, PASHAIE B, DHALI S K. Laser-induced fluorescence of OH radicals in a dielectric barrier discharge [J]. **Applied Physics Letters**, 2002, **77**(19):2970-2972
- [10] OUYANG J M, GUO W, WANG L, *et al.* Numerical simulation of chemical processes in atmospheric plasmas [J]. **Chinese Physics**, 2004, **13**(12):2174-2181
- [11] OUYANG J M, GUO W, WANG L, *et al.* Numerical simulation of chemical processes in helium plasmas in atmospheric environment [J]. **Chinese Physics**, 2005, **14**(1):154-158
- [12] EICHWALD O, YOUSFI M, HENNAD A, *et al.* Coupling of chemical kinetics, gas dynamics, and charged particle kinetics models for the analysis of NO reduction from flue gases [J]. **Journal of Applied Physics**, 1997, **82**(10):4781-4794
- [13] STALDER K R, VIDMAR R J, NERSISYAN G, *et al.* Modeling the chemical kinetics of high pressure glow discharges in mixtures of helium with real air [J]. **Journal of Applied Physics**, 2006,

99(9):093301-093301-8

- [14] 刘忠伟,徐 勇,杨学锋,等. 介质阻挡放电等离子体中 HO_2 自由基的红外光腔衰荡光谱原位诊断[J]. 真空科学与技术学报, 2007, **27**(6):535-539
- [15] 张 静. 介质阻挡放电脱出甲醛的化学动力学研究[D]. 大连:大连理工大学, 2007
- [16] ATKINSON R, BAULCH D L, COX R A, *et al.* Evaluated kinetic and photochemical data for atmospheric chemistry, organic species:supplement VII [J]. **Journal of Physical and Chemical Reference Data**, 1999, **28**(2):191-393
- [17] STEFANOVI I, BIBINO N K, DERYUGI A A, *et al.* Kinetic of ozone and nitric oxides in dielectric barrier discharge in O_2/NO_x and $\text{N}_2/\text{O}_2/\text{NO}_x$ mixture [J]. **Plasma Source Science and Technology**, 2001, **10**(1):406-416
- [18] DAHIYA R P, MISHRA S K, VEEFKIND A. Plasma chemical investigations for NO_x and SO_2 removal from flue gases [J]. **IEEE Transactions on Plasma Science**, 1993, **21**(3):346-348
- [19] 徐士良. FORTRAN常用算法集[M]. 北京:清华大学出版社, 1992
- [20] DYATKO N A, KOCHETOV I V,

NAPARTOCICH A P. Electron energy distribution function in decaying nitrogen plasma [J]. **Journal of Physics D:Applied Physics**, 1993, **26**(3):418-423

- [21] GUERRA V, FRANCISCO M D, JORGE L, *et al.* Time-dependence of the electron energy distribution function in the nitrogen afterglow [J]. **IEEE Transactions on Plasma Science**, 2003, **31**(4):542-551
- [22] 武汉大学, 山东大学计算数学教研室. 计算方法[M]. 北京:人民教育出版社, 1979
- [23] ITIKAWAA Y, MASON N. Cross sections for electron collisions with water molecules [J]. **Journal of Physical and Chemical Reference Data**, 2005, **34**(1):1-24
- [24] ITIKAWA Y, ICHIMURA A, ONDA K, *et al.* Cross sections for collisions of electrons and photons with oxygen molecules [J]. **Journal of Physical and Chemical Reference Data**, 1989, **18**(1):23-42
- [25] MELTON C E. Cross sections and interpretation of dissociative attachment reactions producing OH^- , O^- , and H^- in H_2O^* [J]. **Journal of Chemical Physics**, 1972, **57**(10):4218-4225

Numerical simulation of OH radical in dielectric barrier discharge plasma

XU Yong*, WANG Li-na, LIU Zhong-wei, ZHU Ai-min, ZHAO Guo-li

(Laboratory of Plasma Physical Chemistry, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

Abstract: Electron energy distribution functions for $\text{H}_2\text{O}/\text{He}$ dielectric barrier discharge plasma were obtained by numerically solving the Boltzmann equation. The electron-molecule reaction coefficients were calculated using the computed electron energy distribution functions. A space averaged chemical kinetics in dielectric barrier discharge was reported. The evolution of electron, $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ and $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+)$ produced in the $\text{H}_2\text{O}/\text{He}$ dielectric barrier discharge plasma as a function of time was studied. The generation of electron, $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ and $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+)$ as well as their evolution under the influences of various gas components was also discussed. The results show that the concentrations of $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ and $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+)$ increase while H_2O or O_2 are at low concentration. However, the production of $\text{OH}(\text{X}^2\Pi)$ and $\text{OH}(\text{A}^2\Sigma^+)$ decreases at higher H_2O or O_2 concentration. The calculated result is compared with the experimental data, and they match well with each other. The reaction mechanisms and the main physicochemical processes involved are also discussed.

Key words: dielectric barrier discharge; OH; chemical kinetics; simulation