

CO₂/H₂O等离子体放电机理：浓度比与淬灭压力如何调控反应效率

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/41698.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

CO₂/H₂O等离子体放电机理：浓度比与淬灭压力如何调控反应效率。 低温等离子体技术可在温和条件下将CO₂与H₂O转化为高价值产物，无需贵金属催化剂，极具应用潜力。近日，南昌大学钱沐杨团队在ENG. Chem. Eng.发表研究论文，构建了针板电极大气压非平衡 CO₂/H₂O等离子体二维流体模型，阐明了浓度比与淬灭压力对等离子体放电及关键产物反应路径的调控机制。

研究方法

基于PASSKEY平台搭建二维流体模型，聚焦针板电极构型的等离子体放电过程，核心研究设计如下：

- 1、模型构建：包含26种等离子体粒子（分子、离子、自由基等）和61个关键化学反应，精准复刻CO₂/H₂O等离子体放电的复杂过程；
- 2、变量设置：重点探究两大核心参数——CO₂/H₂O浓度比（ η H₂O=0.1%、1%、10%）和淬灭压力（ $P_q=0, 5, 20, 80, +\infty$ torr），覆盖不同反应工况；
- 3、工具支撑：借助BOLSIQ+计算电子输运参数，通过PHOTOPiC处理光电离模型，结合时空演化分析，全面捕捉放电特性。

核心研究结果

临界约化电场划分放电调控规律

模拟确定200 Td 为临界约化电场（对应电子平均能量 5.5 eV，CO₂解离阈值）。低于该电场时，电子与水分子的强解离吸附主导，水汽含量升高显著降低电子能量与密度，流光通道向对称轴收缩；高于 200 Td 时，电子碰撞解离和电离占优，水汽含量对电子输运参数的影响大幅减弱。

双参数协同调控流光传播

提升淬灭压力可增强光电离，但放电仍以电子直接碰撞电离为核心；低水汽浓度和高淬灭压力均加快流光传播，浓度比调控作用更显著。水汽浓度升高抑制流光径向扩张，淬灭压力提升则增强流光头部局部电场。

关键产物生成-损耗路径明确

CO 主要源于 $e + \text{CO}_2$ 碰撞解离与 $e + \text{CO}_2^+$ 复合，损耗以电子碰撞电离为主；OH 由 $e + \text{H}_2\text{O}$ 碰撞解离生成，主要通过 H 与 OH 复合消耗。二者空间分布与电子密度高度契合，直接电子碰撞解离为核心生成路径。

电子得失机制清晰

电子生成以气体分子电子碰撞电离为主，损耗以离子-电子复合和水分子解离吸附为主，低电场下水分子解离吸附是电子快速损耗的关键。

文章结论

本研究通过二维流体数值模拟，系统阐明了 $\text{CO}_2/\text{H}_2\text{O}$ 浓度比与淬灭压力对大气压非平衡等离子体放电的调控规律，明确了临界电场阈值、流光传播机制及关键产物反应路径。放电以电子直接碰撞电离为核心，水汽电负性与淬灭压力协同调控电子输运与流光行为，为该等离子体转化系统的参数优化和产物调控提供了精准理论依据。（来源：EngineeringJournals微信公众号）

相关论文信息：<https://journal.hep.com.cn/fcse/EN/10.1007/s11705-026-2641-y>

作者：钱沐杨等 来源：《工程·化学工程》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发