



Programa de Pós- Graduação em
Modelagem Computacional
em Ciência e Tecnologia
Universidade Estadual de Santa Cruz - UESC



MODELAGEM COMPUTACIONAL DE TOCHAS DE PLASMA

Ciro Campos Chaves

Orientador: Prof. Doutor Gesil Sampaio Amarante Segundo

30 de agosto de 2017

- 1 Introdução
- 2 Contextualização da pesquisa
 - Problema de pesquisa
 - Questões de pesquisa
 - Hipóteses
 - Objetivo geral
 - Objetivos específicos
 - Justificativa
- 3 Estado da arte
- 4 Procedimentos metodológicos
 - O modelo da tocha
 - Formulação matemática
 - Condições iniciais e de contorno
 - O estudo comparativo: Modificações no gás de trabalho e na geometria da tocha
 - Validação do modelo
 - Geração da malha computacional
- 5 Resultados e discussões
- 6 Conclusões e trabalhos futuros

Introdução

- Plasma: O quarto estado da matéria

Figura: Irving Langmuir (1881 - 1957)

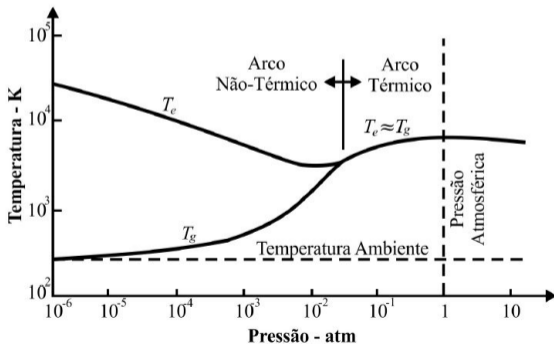


Plasmas para aplicações industriais e tecnológicas

- Plasmas térmicos

Principais características: Altas temperaturas e elevadas densidades de energia

Figura: Demonstração da condição LTE - *Local Thermodynamic Equilibrium*



Exemplos de aplicações

- Fabricação de semicondutores
- Sintetização de materiais
- Soldagem
- Corte térmico
- Polimerização
- Revestimentos anti-corrosivos por aspersion térmica
- Endurecimento superficial
- Produção de aço e ligas especiais
- Secadores industriais
- Destruição de resíduos sólidos urbanos, tóxicos e hospitalares
- etc.

Caracterização dos principais métodos para geração de plasmas

- Plasma DC e AC
- Plasma de Micro-ondas
- Plasma excitado por fonte RF
 - Acoplamento Capacitivo
 - **Acoplamento Indutivo**

Interação: Campo magnético oscilante Versus Plasma

- Frequência de radiação eletromagnética $<$ frequência do elétron de Plasma:
 - Inércia do elétron baixa o suficiente para que o mesmo responda à onda eletromagnética incidente
- Acima desta frequência:
 - Inércia do elétron muito alta para que o mesmo responda à onda eletromagnética incidente
 - Onda livre para se propagar no plasma como que em um meio dielétrico
 - Interação da radiação eletromagnética com os elétrons insignificante
- Interação: Camada superficial ou *Skin Depth*

Contextualização da pesquisa

- Problema de pesquisa
- Questões de pesquisa
 - Questão central
 - Questões secundárias
- Hipóteses
- Objetivo geral
- Objetivos específicos
- Justificativa

Problema de pesquisa

- Projeto e desenvolvimento X Modelos Computacionais

Questão central

- A alteração de parâmetros, como o gás de trabalho ou a geometria da bobina de cobre que envolve o tubo externo, irá alterar características do plasma, como por exemplo os campos de velocidade e de temperatura?

Questões Secundárias

- O quão serão afetados os campos de velocidade e temperatura no interior da tocha, mediante a alteração do gás de trabalho na tocha, mantendo-se fixos outros parâmetros, como a potência da fonte RF, a sua frequência, a vazão do gás na entrada e as outras condições iniciais e de contorno?
- Mantendo-se todos os parâmetros do item anterior fixos, para um só tipo de gás, o quão serão afetados os campos de velocidade e temperatura no interior da tocha, com a alteração no número e espaçamento entre as espiras da bobina?

Hipóteses

- Pelo fato de as equações modelo utilizadas dependerem fortemente das propriedades de transporte do gás de trabalho em questão, espera-se que utilizar diferentes gases irá influir fortemente, principalmente nos campos de temperatura, já que a maioria das propriedades de transporte de um gás dependem fortemente da temperatura.
- Uma tocha de plasma de acoplamento indutivo irá apresentar, segundo a literatura, um comportamento semelhante a um transformador elétrico, sendo o primário a própria bobina da tocha e o secundário o gás de trabalho. Portanto, por conta da indutância mútua, espera-se que a alteração em parâmetros da bobina altere estes parâmetros elétricos, que são definidos em função de parâmetros físicos de descarga do plasma.

Objetivo geral

- O presente trabalho tem como objetivo geral escolher e modelar computacionalmente utilizando o software COMSOL Multiphysics[®] um modelo de tocha de plasma de acoplamento indutivo excitado por fonte RF.

Objetivos específicos

- Escolher um modelo de tocha de plasma acoplada indutivamente que terá a sua geometria utilizada como base para o desenvolvimento da simulação.
- Aplicar todas as simplificações, condições de contorno e iniciais citadas na metodologia deste trabalho para a resolução do modelo, mantendo-se fixas, além das condições iniciais e de contorno, a vazão do gás, potência e frequência da fonte RF e alternando o gás de trabalho entre Argônio, Oxigênio e Nitrogênio, comparando entre si, em seguida, os resultados obtidos para o campo de velocidade e o campo de temperatura no interior da tocha.
- Segundo as mesmas condições do item anterior, em se tratando das condições iniciais, de contorno e os outros parâmetros citados, efetuar modificações no número de espiras e no espaçamento entre as espiras da bobina da tocha, comparando em seguida os resultados obtidos para o campo de velocidade e o campo de temperatura no interior da tocha.

Justificativa

- Vantagens na utilização da tocha escolhida (ROTH, 1995):
 - Maior pureza no processo
 - Maior vida útil dos componentes do reator
 - Maior confiabilidade

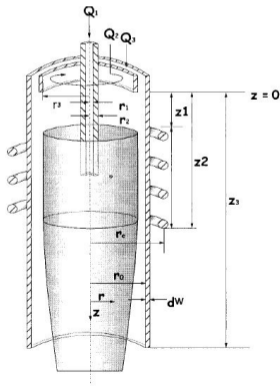
Estado da arte

- Mostaghimi et al. (1987)
- Mostaghimi e Boulos (1990)
- Xue et al. (2001)
- Bernardi et al. (2003)
- Colombo e Ghedini (2007)
- Jia et al. (2010)
- Brezmes e Breitkopf (2015)
- Chen et al. (1998)

O modelo da tocha

- Adaptado de (COLOMBO; GHEDINI, 2007); (BERNARDI et al., 2003); (MERKHOUF; BOULOS, 2000); (XUE et al., 2001); (DOLBEC et al., 2013)

Figura: Modelo base da tocha utilizado



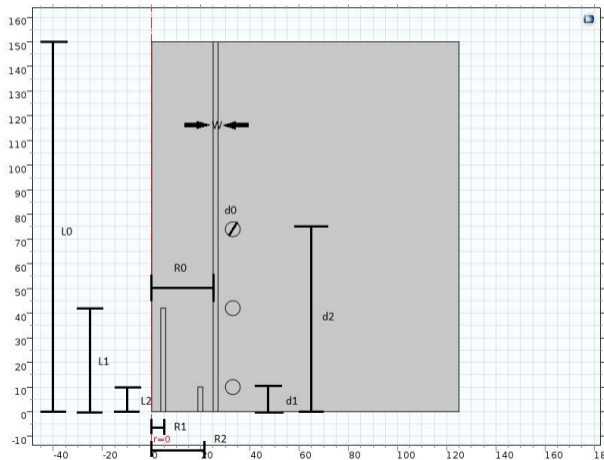
Fonte: (MERKHOUF et al, 2000)

O modelo da tocha

- Tubo externo:
 - Carrega o fluxo de gás auxiliar Q_3
 - Gás escoado ao longo da parede do tubo de confinamento
 - Irá reduzir as perdas convectivas
- Tubo intermediário:
 - Fluxo de gás Q_2
 - Injetado entre o tubo intermediário e central
 - Onde ocorre a descarga ionizante
 - Isola o plasma do tubo externo
- Tubo central:
 - Fluxo de gás Q_1
 - Introduz materiais reativos ou pólvoras utilizadas em tratamento de superfícies (quando existe)

O modelo da tocha

Figura: Geometria desenhada no COMSOL



Fonte: (Elaboração própria, 2017)

Medidas destacadas na tocha

Tabela: Medidas em destaque da tocha de plasma modelada

Label	Medida [mm]
L_0	150
L_1	42
L_2	10
R_0	25
R_1	3.7
R_2	18.8
d_0	6
d_1	10
d_2	74
$\delta\omega$	2

Fonte: (LANCASTER, 1986)

Formulação matemática

- Aproximação teórica: Aproximação Magnetohidrodinâmica (MHD)
(BITTENCOURT, 2004)

Dinâmica dos fluidos

- Continuidade
- Momentum (formulação geral)
- Energia

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\nabla \cdot \mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{D(\rho \mathbf{u})}{Dt} = -\nabla \cdot \hat{\mathbf{T}} \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + [\rho \mathbf{u} h - k \nabla T - \hat{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{u}] \quad (3)$$

Equações de Maxwell

- Lei de Gauss
- Lei de Gauss para o magnetismo
- Lei de Ampère
- Lei de Faraday da indução

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_v \quad (4)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (5)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (6)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (7)$$

Equações MHD no COMSOL Multiphysics®

- Interface física: *Equilibrium Inductively Coupled Plasma*
- Físicas acopladas:
 - *Laminar Flow*
 - *Magnetic Fields*
 - *Heat Transfer in Fluids*

Equações MHD no COMSOL Multiphysics®

- Equação vetorial de Poisson
- Transferência de calor no fluido
- Equação da continuidade
- Equação do momentum

$$\nabla^2 \mathbf{A} = -\mu_0 \mathbf{J} \quad (8)$$

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T \right) - \nabla \cdot (k \nabla T) = Q \quad (9)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\nabla \cdot \mathbf{u}) = 0 \quad (10)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = \nabla \cdot \left[-p \mathbf{I} + \mu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u}^T)) - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right] + \mathbf{F} \quad (11)$$

Equações MHD no COMSOL Multiphysics®

- Na equação 9, o termo fonte Q é dado por:
 - Perdas Ôhmicas: $\mathbf{Q} = \mathbf{J} \cdot \mathbf{E}$;
 - Perdas por radiação volumétrica líquida, Q_{rad} , dependente das propriedades do material;
 - Transporte de Entalpia (energia transportada pela corrente elétrica):
- O campo elétrico proveniente das perdas Ôhmicas mostrado é dado em termos do vetor potencial magnético:

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

Condições e simplificações submetidas ao modelo

- A tocha de plasma é modelada seguindo configuração 2D com simetria no eixo axial;
- Componente axial da corrente elétrica é desprezada;
- Componente tangencial da velocidade é desprezada;
- Escoamento Laminar em estado estacionário, à pressão atmosférica;
- Plasma opticamente fino, sob as condições de equilíbrio termodinâmico LTE;
- Dissipação viscosa e trabalho realizado pela pressão na equação da energia são desprezados;
- Campos de velocidade, magnéticos e de temperatura nas equações é 2D.

Condições iniciais e de contorno

$$v_z = \begin{cases} \frac{Q_1}{\pi R_1^2}, r \leq R_1 \\ \frac{Q_2}{\pi(R_2^2 - R_1^2)}, R_2 \leq r \leq R_1 \\ \frac{Q_3}{\pi(R_0^2 - R_2^2)}, R_0 \leq r \leq R_2 \end{cases} \quad (12)$$

$$v_r = 0 \quad (13)$$

$$T = 300K \quad (14)$$

$$\mathbf{n} \times \mathbf{A} = 0 \quad (15)$$

$$-\mathbf{n}(-k\nabla T) = 0 \quad (16)$$

- Condição *no-slip*
- Valores iniciais para campos de velocidade, pressão e vetor potencial magnético nulos

Demais condições

- Frequência da fonte RF: 3 MHz
- Vazão do gás que flui na entrada da tocha:
 - $Q_3 = 25$ lpm (tubo intermediário ou *carrietube*)
 - $Q_2 = 3$ lpm (Entre tubo intermediário e central)
 - $Q_1 = 1$ lpm (tubo central)
- Potência RF aplicada na bobina:
 - 15 KW, para os casos de modificações no gás de trabalho
 - 11 KW, para os casos de modificação na geometria da bobina, para o gás Argônio

Modificações no gás de trabalho

- Argônio
- Oxigênio
- Nitrogênio

Modificações na geometria da tocha

As modificações serão feitas no espaçamento entre as espiras, bem como no número de voltas:

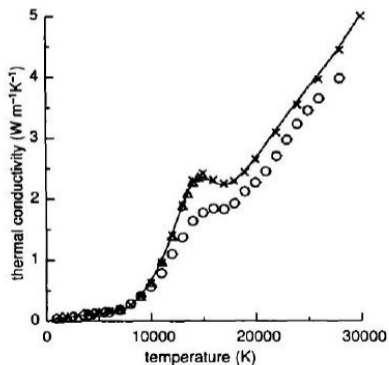
- 3 voltas
- 4 voltas, $L = 32 \text{ mm}$
- 4 voltas, $L = 20 \text{ mm}$

Validação do modelo

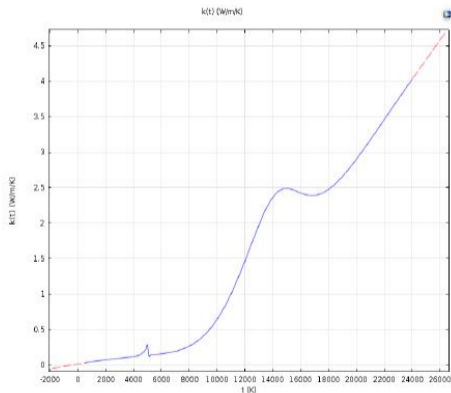
- Aqui, iremos verificar se a condutividade térmica dos gases utilizados dadas pelo COMSOL são condizentes com resultados experimentais encontrados na literatura.

Validação do modelo

Figura: Comparação da condutividade térmica dada por Murphy et al (1994) e pelo COMSOL para o gás Argônio



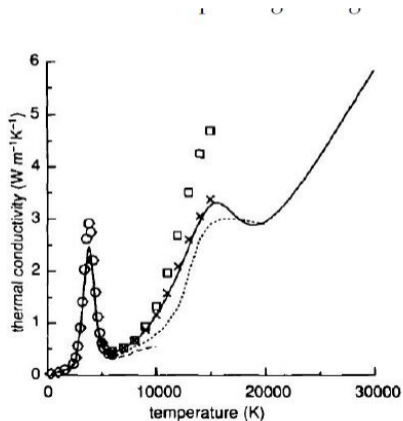
(a) Resultados dados por Murphy *et al* (1994).



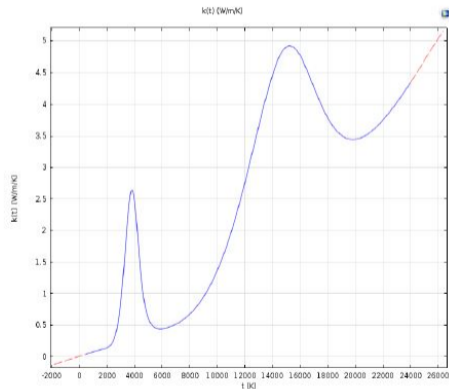
(b) Resultados dados pelo COMSOL.

Validação do modelo

Figura: Comparação da condutividade térmica dada por Murphy et al (1994) e pelo COMSOL para o gás Oxigênio



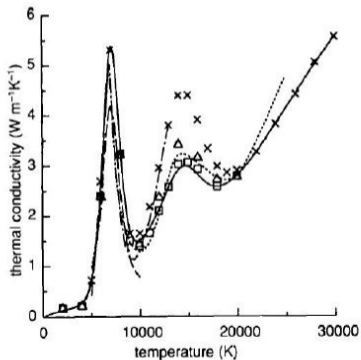
(a) Resultados dados por Murphy *et al* (1994).



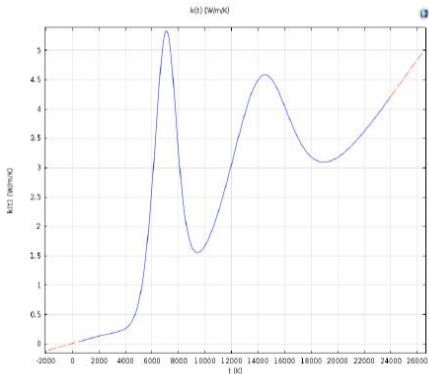
(b) Resultados dados pelo COMSOL.

Validação do modelo

Figura: Comparação da condutividade térmica dada por Murphy et al (1994) e pelo COMSOL para o gás Nitrogênio



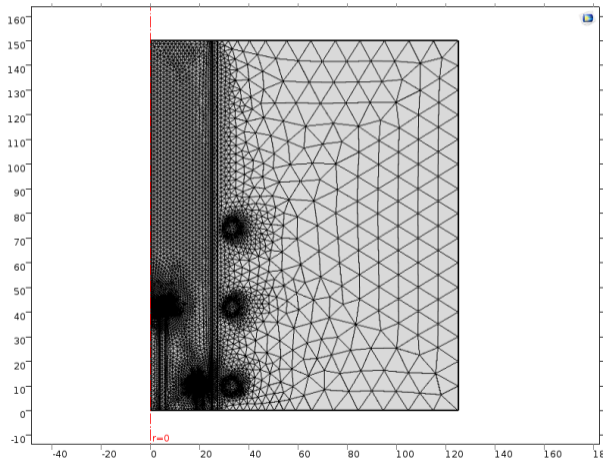
(a) Resultados dados por Murphy *et al* (1994).



(b) Resultados dados pelo COMSOL.

Geração da malha computacional

Figura: Malha adaptativa não estruturada gerada pelo COMSOL



Fonte: Elaboração própria (2017).

Resultados e discussões: Modificações no gás de trabalho

- Temperatura máxima alcançada

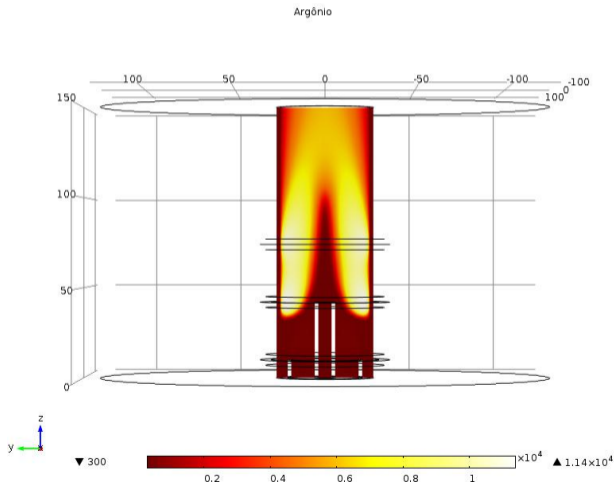
Tabela: Temperatura máxima alcançada

Gás	Temperatura [K]
Argônio	11400
Oxigênio	4167
Nitrogênio	3073

(Elaboração própria, 2017)

Resultados e discussões

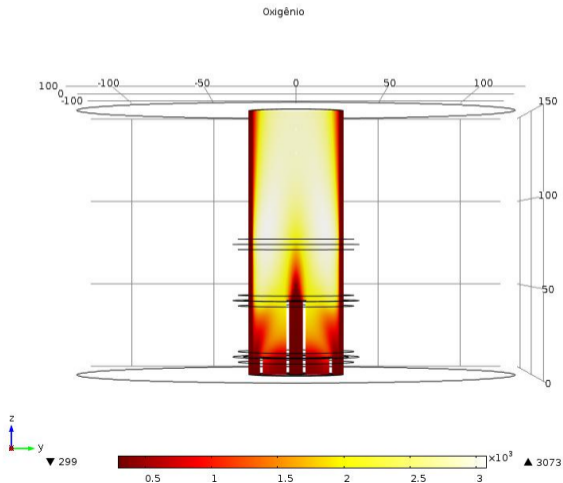
Figura: Distribuição de temperaturas para o gás Argônio



(Elaboração própria, 2017)

Resultados e discussões

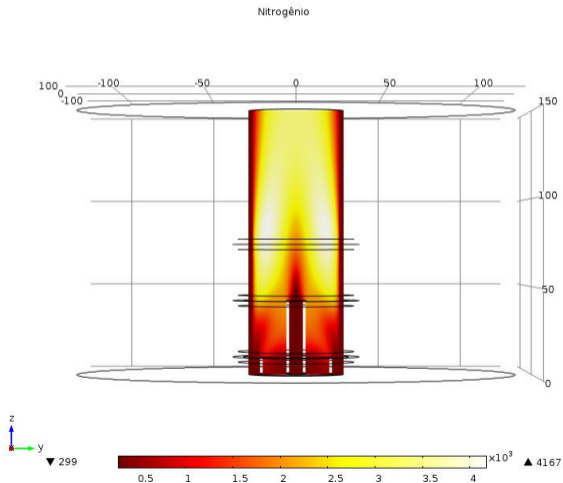
Figura: Distribuição de temperaturas para o gás Oxigênio



(Elaboração própria, 2017)

Resultados e discussões

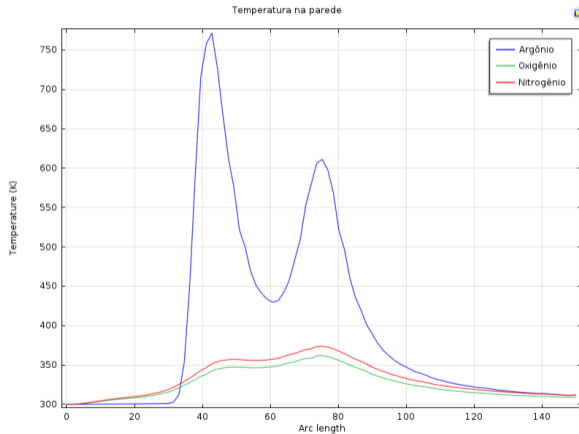
Figura: Distribuição de temperaturas para o gás Nitrogênio



(Elaboração própria, 2017)

Resultados e discussões

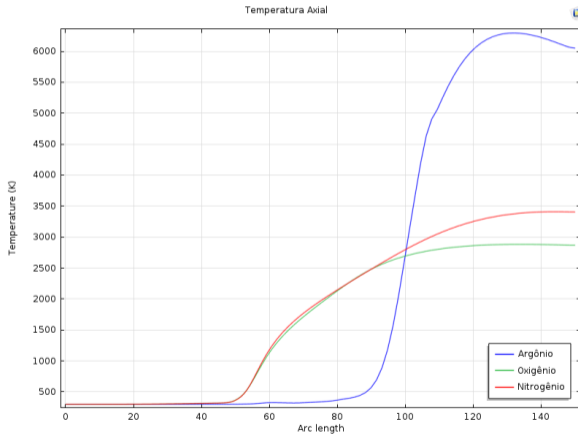
Figura: Temperatura nas paredes do tubo externo da tocha



(Elaboração própria, 2017)

Resultados e discussões

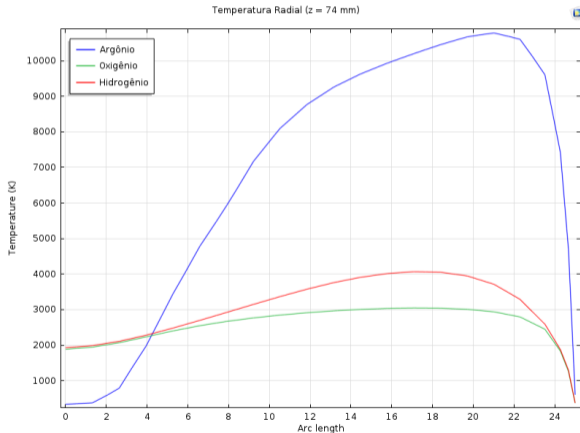
Figura: Temperatura no centro da tocha



(Elaboração própria, 2017)

Resultados e discussões

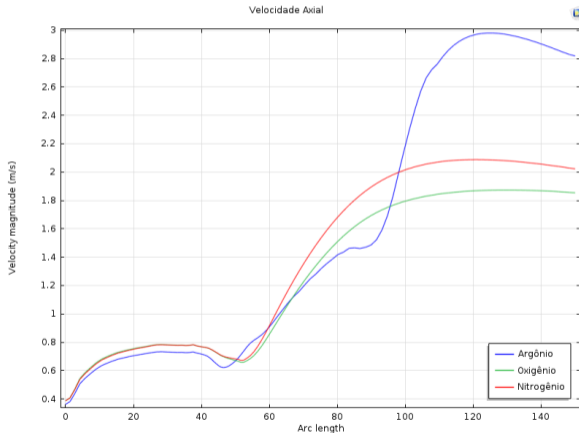
Figura: Temperatura radial na altura da terceira espira



(Elaboração própria, 2017)

Resultados e discussões

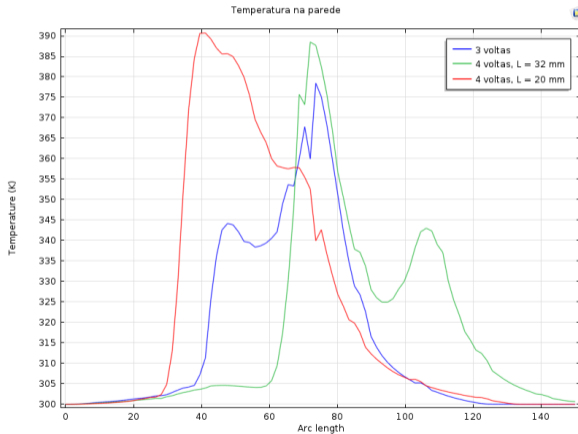
Figura: Velocidade no centro da tocha



(Elaboração própria, 2017)

Resultados e discussões

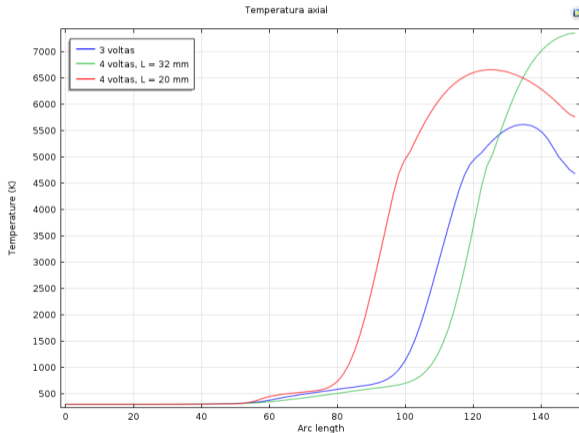
Figura: Temperatura na parede para as geometrias propostas, gás Argônio



(Elaboração própria, 2017)

Resultados e discussões

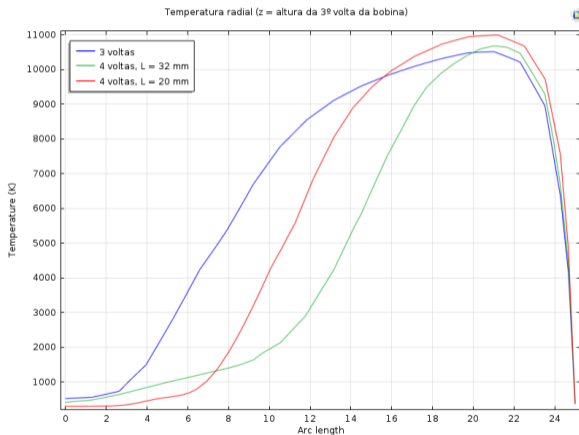
Figura: Temperatura central para as geometrias propostas, gás Argônio



(Elaboração própria, 2017)

Resultados e discussões

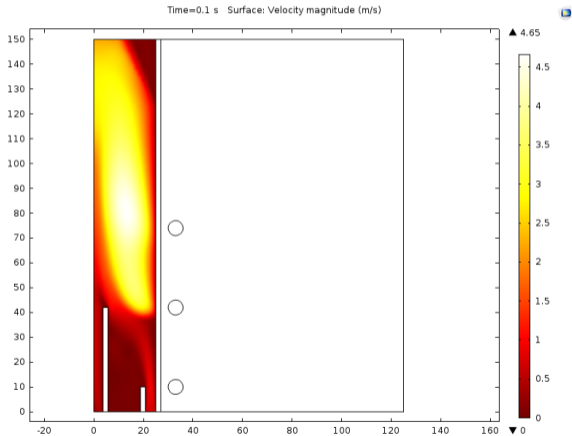
Figura: Temperatura radial na altura da terceira espira, gás Argônio



(Elaboração própria, 2017)

Resultados e discussões

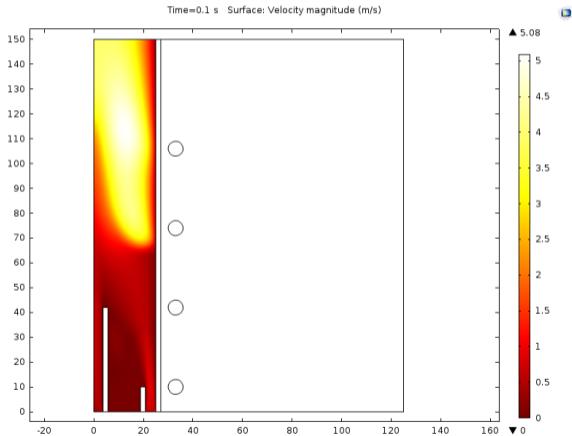
Figura: Distribuição do campo de velocidades no interior da tocha, 3 espiras



(Elaboração própria, 2017)

Resultados e discussões

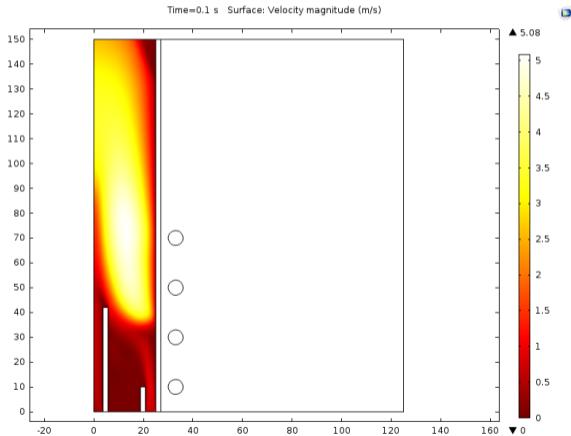
Figura: Distribuição do campo de velocidades no interior da tocha, 4 espiras, $L = 32$ mm



(Elaboração própria, 2017)

Resultados e discussões

Figura: Distribuição do campo de velocidades no interior da tocha, 4 espiras, L = 20 mm



(Elaboração própria, 2017)

Conclusões e trabalhos futuros

- Maiores temperaturas do Argônio: Denota maior eficiência no processo de transferência de energia para o plasma quando o gás é Argônio
- Temperaturas maiores concentradas em regiões mais próximas às paredes da bobina: Por conta do processo de transferência de energia por indução (mais quente nas proximidades da bobina)
- Perfil de temperaturas mais uniforme para Oxigênio e Nitrogênio em relação ao Argônio: Maior condutividade térmica destes dois gases. Por conta da mobilidade da espécie, gases mais leves têm maior condutividade térmica
- Temperatura nas paredes em valores seguros: Vide temperatura de fusão do Quartzo
- Maior número de espiras: Maiores temperaturas alcançadas
- Modificação no espaçamento das espiras: Alteração espacial do campo magnético, bem como alteração nos perfis de velocidade e temperatura

Conclusões e trabalhos futuros

- Em relação às hipóteses levantadas: Realmente, as alterações no gás de trabalho modificam bastante a distribuição de temperaturas, por conta das propriedades do transporte dos gases utilizados, como pode se observar em relação aos gráficos de condutividade térmica, por exemplo
- Em relação às hipóteses levantadas: Modificações na geometria alteram a indutância mútua do modelo do transformador, bem como alterando a disposição espacial do campo magnético gerado pela corrente da bobina que envolve o tubo externo da tocha

Conclusões e trabalhos futuros

- Em se tratando de trabalhos futuros, sugere-se:
 - Considerar misturas de gases para formação do gás de trabalho
 - Outras alterações na geometria: No formato e distribuição dos tubos
 - Modificações nos materiais empregados para a construção: Análise dos custos envolvidos (material e gases)
 - Simulações multidimensionais: Contribuições mais realistas, inserção de parâmetros ao modelo que a geometria 2D com simetria não leva em conta

Agradecimentos



fapesb

