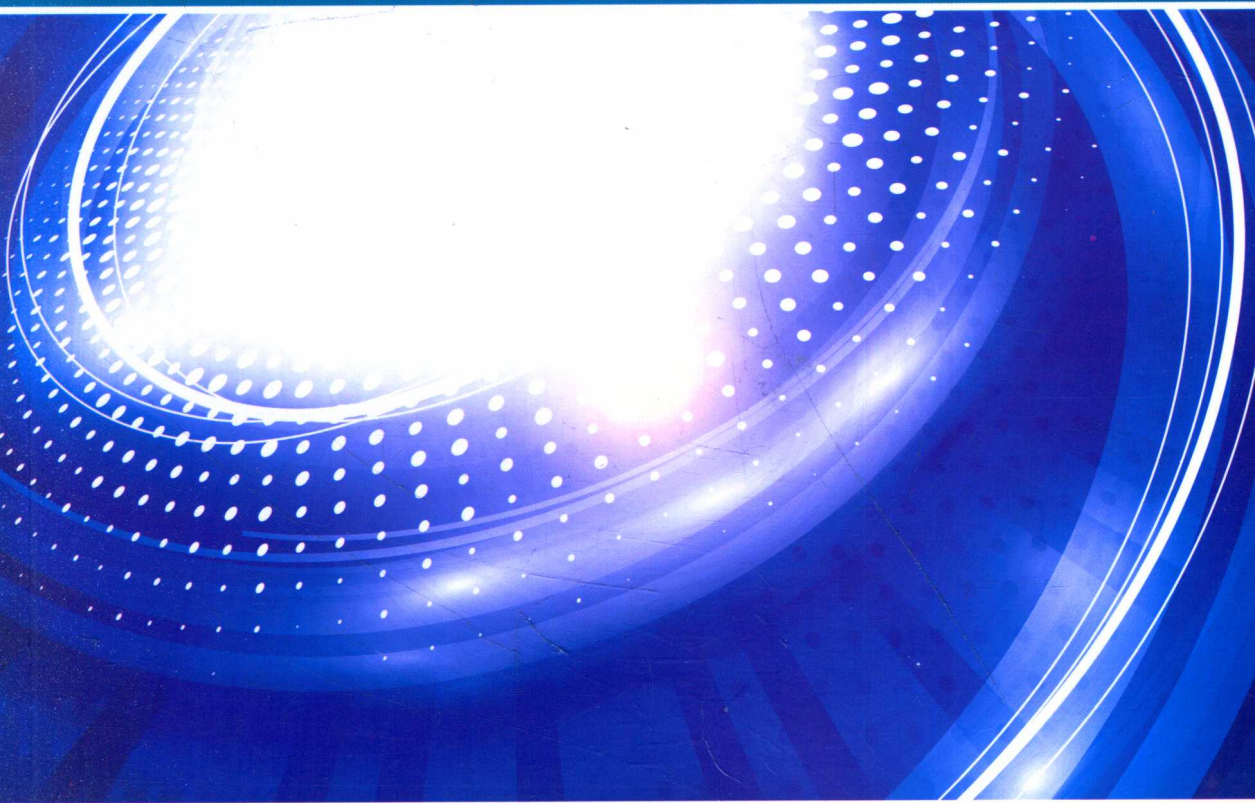


RIDGE WAVEGUIDE EXPERIMENTAL TRANSMISSION SYSTEM DESIGN AND
MECHANISM ANALYSIS FOR STUDYING MICROWAVE NON-THERMAL EFFECT

微波非热效应的脊波导实验 传输系统设计与机理研究

田文艳 / 著



中国工信出版集团



电子工业出版社
PUBLISHING HOUSE OF ELECTRONICS INDUSTRY
<http://www.phei.com.cn>

微波非热效应的脊波导 实验传输系统设计与机理研究

田文艳 著

電子工業出版社
Publishing House of Electronics Industry
北京 • BEIJING

内 容 简 介

本书系统地介绍了微波非热效应的研究方法、实验装置的优化设计、实验系统的构建、微观动力学理论计算分析。首先,针对微波非热效应研究的瓶颈问题和目前研究常用实验装置存在的局限性,通过电磁仿真软件优化设计加工了窄壁和宽壁开孔脊波导实验装置,并利用多物理场耦合计算验证该装置的可行性;然后,基于该装置搭建实验系统进行非热效应实验研究;最后,利用微观分子动力学计算方法研究非热效应的作用机理。这些研究可为微波非热效应研究开辟一条新途径并提供了重要的实验和理论依据,同时也为微波非热效应作用机理的研究和解决微波能工业化生产过程中的关键性问题打下坚实基础,具有重要的科学意义。

本书可以作为电子信息类、无线电物理、电磁场与微波技术、物理化学类等相关学科教师 and 学生的参考用书,也可供有关工程技术人员参考阅读。

未经许可,不得以任何方式复制或抄袭本书之部分或全部内容。
版权所有,侵权必究。

图书在版编目(CIP)数据

微波非热效应的脊波导实验传输系统设计及机理研究 / 田文艳著. —北京: 电子工业出版社, 2016.1
ISBN 978-7-121-27929-4

I. ①微… II. ①田… III. ①双脊波导—微波测量设备—系统设计—研究 ②微波—作用—理论—研究 IV. ①TN814 ②TN015

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2015) 第 310378 号

策划编辑: 徐蔷薇

责任编辑: 徐蔷薇 特约编辑: 刘广钦

印 刷: 北京季蜂印刷有限公司

装 订: 北京季蜂印刷有限公司

出版发行: 电子工业出版社

北京市海淀区万寿路 173 信箱 邮编: 100036

开 本: 720×1 000 1/16 印张: 11 字数: 203 千字

版 次: 2016 年 1 月第 1 版

印 次: 2016 年 1 月第 1 次印刷

定 价: 39.00 元

凡所购买电子工业出版社图书有缺损问题, 请向购买书店调换。若书店售缺, 请与本社发行部联系, 联系及邮购电话: (010) 88254888。

质量投诉请发邮件至 zltts@phei.com.cn, 盗版侵权举报请发邮件至 dbqq@phei.com.cn。

服务热线: (010) 88258888。

作者简介



田文艳，女，1983 年 4 月生，山西朔州人。2012 年毕业于四川大学无线电物理专业，获得博士学位，现为太原科技大学副教授，硕士生导师，欧洲 AMPERE 组织会员，*International Journal of Applied Electromagnetics and Mechanics*、*Progress in Electromagnetics Research* 和 *Superlattices and Microstructures* 等 SCI 期刊审稿专家。2014 年荣获“太原科技大学优秀青年教师”先进个人称号。近年来，发表学术论文 20 余篇，其中 SCI 收录 13 篇；主持国家自然科学基金青年基金 1 项、省级项目 2 项、市级项目 1 项；授权国家专利 2 项；授权软件著作权 3 项。

Preface



前言

能源是人类社会发展的重要基础资源，节能环保已经成为世界各国的核心议题。面对人口众多、能源严重短缺的现状，推进节能减排更是迫在眉睫，并成为我国经济可持续发展的基本国策。我国单位 GDP 的能耗和污染物排放是国际平均水平的 3~4 倍，其中仅石油、农业、医药、食品化工等化工行业就占全国工业能耗和二氧化硫、氧化亚氮、甲烷等排放的近 20%。目前，我国化工行业正在进入新一轮的大力发展期，近年来的耗能平均增速高达 20.6%。由于化工行业在我国国民经济中占据重要地位，同时是耗能和排放的大户，因此如果在化工行业很好地实施节能减排工作，会大大降低我国的能耗和排放状况，这将对我国实现节能减排的基本国策具有强有力的推动作用。众所周知，多数化工生产普遍涉及大规模的高温处理，一些催化剂、溶剂和中间体会带来严重的能源浪费和环境污染。因此，改变传统的化工生产方式对完成我国节能减排目标来说至关重要。

微波作为一种新型高效无污染能源，是一种与被加热物质直接相互作用的选择性加热方式，具有显著的高效、节能、清洁、无污染的特点，与传统的化工处理方式比较，微波加热不仅可以极大地提高能源利用率，达到节能减排的目的，而且可以实现一些常规条件下无法实现的化学反应。现在微波



能已经被广泛应用于从无机反应到有机反应,从医药化工到食品化工,从简单分子反应到复杂生命过程的各个化学领域。然而,在实际化工生产过程中,大功率微波作用于复杂时变媒质时很容易产生热点、热失控,甚至导致爆炸产生,如意大利 Milestone 公司生产的微波化学反应器就因为在国内发生过爆炸伤人事件而几乎彻底退出中国市场。目前,微波与化学反应体系的作用机理和本质仍不清楚,还没有一套系统的理论可以指导微波源在化工中的高效安全应用。正如美国著名微波能应用专家 D. E. Clark 在第二届世界微波能应用大会上指出:“在微波能应用从实验到工业转化过程中,目前存在的技术困难是对微波同物质的相互作用机理研究不够引起的。所以,目前人们对微波能源的利用和控制方面还相对薄弱,很难做到真正在工业上的广泛应用。”因此,微波与复杂时变媒质的相互作用机理研究对于实现微波能的工业化应用至关重要。

对于微波与物质相互作用机理,微波为何及如何加速化学反应进程的确切原因,学术界一直存在较大争议。S. Shazman、P. M. Reddy 和 Q. Yang 等学者认为当微波作用于化学反应时,微波热效应是加快化学反应的唯一因素,而 M. Ballardin、S. Horikoshi 和 J. Wang 等学者则坚持虽然现在非热效应没有得到充分的证实,但确实存在微波非热效应。2011 年在法国图卢兹举行的微波化学会议和 2013 年于英国诺丁汉举行的世界微波化学大会上都有对微波化学反应“非热效应”的专门报道。在微波作用化学反应的研究过程中,发现了许多有别于传统加热的“非热效应”。多方面的研究结果都似乎表明:微波作用存在非热效应。但是,令人遗憾的是,到底是否存在微波非热效应,这一问题一直没有得到充分证实。

目前大部分非热效应的验证工作是以实验为基础的,并且许多学者认为实验验证是证明微波非热效应存在的一种切实有效的方法。而现在一般用于非热效应研究的实验装置是家用微波炉或由家用微波炉改造而成的,且实验系统和实验方法设计也不尽合理,这给微波非热效应实验研究带来很大的局限性。

本书采用宏观实验测量和微观动力学理论计算相结合的方式,在宏观层

面设计特殊微波实验装置和实验方法对可表征微观变化情况的宏观非微波参量进行测量；在微观层面利用微观动力学方法计算与宏观参量相关的氢键体系溶液团簇结构、氢键参数势函数、平均氢键数等微观特性参数。微观研究结果为宏观研究提供最佳的微波作用条件，而宏观实验结果反过来又对微观研究结果进行验证，宏观研究与微观研究紧密结合相互支撑。本书研究成果将为微波作用下是否存在非热效应这一具有争议的科学问题开辟了一条新途径并提供了重要的实验和理论依据，同时也为微波非热效应作用机理的研究和解决微波能工业化生产过程中的关键性问题打下坚实的基础，具有重要的科学意义。

感谢四川大学电子信息学院黄卡玛教授的大力支持和对相关研究工作给予的悉心指导；感谢国家自然科学基金青年基金项目（No. 61401298）和山西省青年科技研究基金项目（No. 2015021094）对相关研究工作的资助。

由于微波非热效应研究涉及的理论及实验验证较复杂，还存在需要进一步研究探讨的问题。由于作者学识水平有限，本书难免存在不足之处，恳请同行专家、学者和广大读者给予批评指教。

Contents



目 录

第 1 章 引言	1
1.1 微波非热效应争议	4
1.2 微波效应机理	7
1.2.1 微波热效应机理	7
1.2.2 微波非热效应机理	11
1.3 微波非热效应研究方法及其局限性	14
1.4 本书的主要研究内容	17
1.5 本书的内容安排	19
第 2 章 微波加热流体多物理场数值计算	23
2.1 微波加热数值计算方法简介	25
2.1.1 有限元法	25
2.1.2 有限元法分析的基本步骤	26
2.2 微波加热流体多物理场耦合求解	29
2.2.1 电磁场的求解	29



2.2.2	热传导的求解	30
2.2.3	流体场的求解	32
2.3	等效介电系数的更新	34
2.3.1	微波作用下氯化钠水溶液等效复介电系数的更新	35
2.3.2	微波作用下二甲基亚砷-氯化钠水溶液等效复介电系数的更新	36
2.4	多物理场耦合	37
2.5	本章小结	38
第3章	窄壁开孔脊波导	39
3.1	设计原理及结构	41
3.2	仿真及结果	43
3.3	基于窄壁开孔脊波导氯化钠水溶液在微波作用过程中的多物理场计算	44
3.3.1	计算模型边界条件	45
3.3.2	计算结果及讨论	46
3.4	本章小结	51
第4章	基于窄壁开孔脊波导的微波非热效应实验研究	53
4.1	实验系统	55
4.2	氯化钠水溶液在微波作用过程中的温度测量	57
4.3	氯化钠水溶液在微波作用下的电导率变化	58
4.4	本章小结	64
第5章	宽壁开孔脊波导	65
5.1	设计原理及结构	67
5.2	仿真及结果	70
5.3	窄壁和宽壁开孔脊波导中二甲基亚砷-氯化钠水溶液在微波作用过程中的多物理场计算	71

5.3.1	计算模型所加边界条件	71
5.3.2	计算结果及讨论	72
5.4	本章小结	81
第 6 章	基于宽壁开孔脊波导的微波非热效应实验研究	83
6.1	实验系统	86
6.2	二甲基亚砷-氯化钠水溶液在微波作用过程中的温度测量	88
6.3	二甲基亚砷-氯化钠水溶液在微波作用下的电导率变化	89
6.3.1	水与二甲基亚砷摩尔数之比为 2/1 的溶液在微波 作用下电导率变化	90
6.3.2	水与二甲基亚砷摩尔数之比为 3/1 的溶液在微波 作用下电导率变化	92
6.3.3	水与二甲基亚砷摩尔数之比为 4/1 的溶液在微波 作用下电导率变化	95
6.3.4	水与二甲基亚砷摩尔数之比为 5/1 的溶液在微波 作用下电导率变化	97
6.4	本章小结	99
第 7 章	微波辐照下电解质溶液的非平衡态分子动力学模拟	101
7.1	分子动力学模拟的基本理论	104
7.1.1	分子动力学模拟基本原理	104
7.1.2	分子动力学模拟基本流程	106
7.1.3	牛顿运动方程数值解法	106
7.1.4	积分时间步长选取	109
7.2	分子动力学模拟常用力场	109
7.3	周期性边界条件与最近镜像	114
7.4	系综	117
7.5	本章小结	117



第 8 章 微波非热效应的非平衡态分子动力学计算	119
8.1 微波作用体系溶液的选择	121
8.2 分子动力学模拟细节	123
8.3 结果与讨论	124
8.3.1 径向分布函数	124
8.3.2 配位数和平均氢键数	131
8.3.3 电导率	132
8.3.4 氢键键长和键角	134
8.4 本章小结	137
参考文献	139

Chapter 1



第 1 章

引 言

- 1.1 微波非热效应争议
- 1.2 微波效应机理
- 1.3 微波非热效应研究方法及其局限性
- 1.4 本书的主要研究内容
- 1.5 本书的内容安排

微波技术经过几十年的发展,已成为一门比较成熟的学科,在雷达、通信、电子对抗、工业生产及科学研究等方面^[1~7]得到了广泛应用。自从1986年 Richard Gedye 研究组^[8]和 Raymond. J. Giguere /George Majetich^[9]首次成功利用微波辐射 4-氰基苯氧离子与氰苄的 SN_2 亲核取代反应使反应速率提高1240倍,并且产率也有不同程度提高开始,微波能在化学和化工方面显示出巨大的发展前景,越来越多的学者开始研究微波在化学合成、萃取和催化方面的应用。微波现在已经被广泛应用于从无机反应到有机反应,从医药化工到食品化工,从简单分子反应到复杂生命过程的各个化学领域^[10~30]。然而,对于微波与物质相互作用机理、微波为何及如何加速化学反应进程的确切原因,学术界一直存在很大的争议^[31~33]。一些科学家认为当微波作用于化学反应时,微波热效应是加快化学反应的唯一因素^[34~39]。而另一些科学家则认为虽然现在非热效应没有得到充分的解释,但确实存在微波非热效应^[40~46]。到底是否存在微波非热效应?这一问题一直没有定论^[47]。目前,大部分非热效应的验证工作是以实验为基础的,并且许多学者认为实验验证是证明微波非热效应存在的一种切实有效的方法。因此,本书特殊设计了两种用于微波非热效应研究的脊波导传输系统。

本章主要介绍本书工作的研究基础和研究背景。首先,介绍了微波非热效应的争议;其次,介绍了微波效应机理;再次,介绍了微波非热效应的研究方法及其局限性,以及多物理场耦合计算;最后,介绍了本书的主要研究内容、创新点及各章的内容安排。

1.1 微波非热效应争议

近些年来,微波作为一种非传统的能量源已经引起人们的极大关注,并且已成功应用于许多领域。然而,对于微波能量作用于化学反应以提高反应速率这个问题,学术界一直存在很大的争议,形成了两大对立阵营。一些科学家认为当微波作用于化学反应时,微波热效应是加快化学反应的唯一因素。而另一些科学家则认为虽然现在非热效应没有得到充分的解释,但确实存在微波非热效应。到底是否存在微波非热效应?迄今为止这个问题一直没有定论。

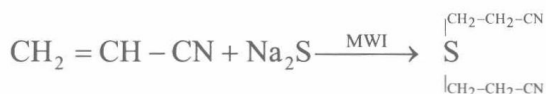
现在很多科学家认为,虽然微波是一种内加热,具有加热速度快、加热均匀无温度梯度、加热高效无滞后效应等特点,但微波应用于化学反应仅仅是一种加热方式,和传统的加热方式一样。其反应速率提高的原因是单纯的热效应,也就是在微波场内照射极性物质时,可以迅速达到很高反应温度的结果。

科学家 Jahngen 等^[48]对微波作用下 ATP 水解反应进行了研究,得出的结论是微波加热与传统加热方式对反应的影响基本一致,反应动力学无明显差别。Ranev 等^[49]对 2, 4, 6-三甲基苯甲酸与异丙醇酯化反应动力学的研究表明,2, 4, 6-三甲基苯甲酸的酯化速度与加热方式无关。Hosseini 等人^[50]在研究微波作用于有机金属反应时发现,虽然反应速率有很大的提高,但是所获得的产物与同样温度油浴条件下所得到的结果并无差异。他们认为该现象主要是由微波加热导致温度上升引起的,微波加热与传统加热实际上是相同的,非热效应不存在。

另一些科学家则坚信微波非热效应的存在,他们认为由于微波对化学反应的作用机理是非常复杂的,因此,微波除了具有热效应外,还存在一种不是由温度引起的效应,即微波非热效应。微波非热效应指的是一种无法用

温度变化来解释的特殊效应。它可归类为“不能用单纯的热效应或者特殊微波效应解释的微波场对化学反应转化率的提高”。

科学家 Dayal 等^[51]用微波将胆汁酸与牛磺酸合成了胆汁酸的衍生物，反应 10min，产率达 70%以上，Dayal 试着用油浴在与微波相近的温度下，也加热 10min 得到产物，但未成功。因此，他们认为微波存在非热效应，并且在反应中起作用。乔晓光等^[52]研究了丙烯腈与硫化钠的迈克尔加成生成硫代二丙腈的反应。



该反应对温度要求很严格，必须控制在 10℃~15℃，温度过高则产物水解成硫代二丙酸钠。作者利用自行设计的微波恒温常压反应装置，控制温度在 10℃情况下，用微波加热 1min 成功合成了硫代二丙腈，产率达到 82.5%，比传统加热法提高 360 倍，作者认为微波非热效应可能对该反应的加速进行了决定性作用。

Escriba 等^[53]报道了甘油醇经酯化-氯化反应生成氯化甘油酯的反应，如图 1.1 所示。在微波作用下该反应改变了反应的区位选择性，反应产率得到了显著提高，还生成了更多的化合物，而该化合物在常规加热条件下很难生成且产率很低。作者认为微波非热效应作用引起了区位选择性及反应产率的差异性。

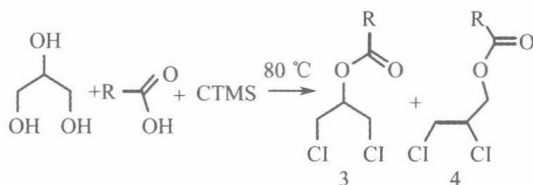


图 1.1 氯化甘油酯的合成

近年来，人们常把特殊效应与非热效应相混淆，用微波特殊效应或者微波非热效应来描述除微波热效应以外的其他效应。一般来说，热效应和非热效应都应该属于特殊效应，但是特殊效应并不等同于热效应或非热效应。特

殊效应是微波作用于反应体系所产生的特有效应，并不排除与温度的相关性。

可以用温度变化来解释的特殊效应是热效应，例如，微波加热与传统加热不同造成的局部过热现象^[54]，在加热过程中由于盛放液体的石英试管不吸收微波能量，只有液体被加热，这样在容器壁和溶液之间很难形成气化核，因此，致使溶液内部因缺乏气化核而在温度高于溶液传统沸点时仍不会沸腾。又如，由于微波选择性加热引起的热点现象，Motoyas 与 Agrawal 成功观测到微波作用于磁铁矿和赤铁矿时的热点现象^[55]，如图 1.2 所示。该热点形成主要有以下几个因素：①腔体内非均匀分布的电磁场；②被作用物质介电损耗不均匀；③反应物和生成物具有不同的热传导系数。

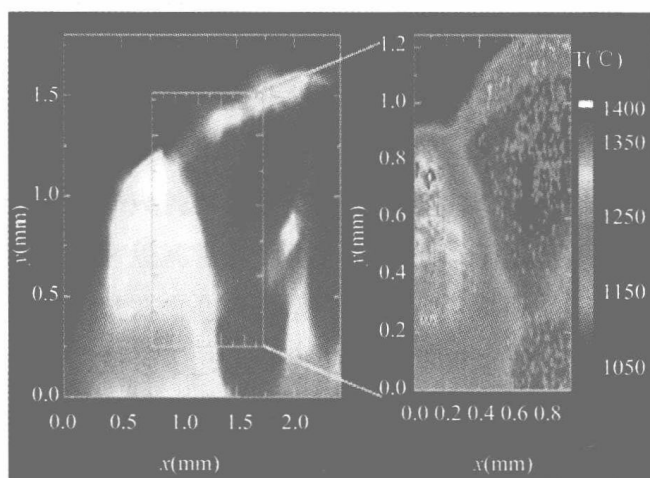


图 1.2 微波作用于磁铁矿和赤铁矿的热点现象

难以用温度变化和特殊温度分布去解释的特殊效应称为非热效应，例如，微波辐照枯草杆菌孢子及低温催化效应等^[56]。Agrawal^[57] 等人在 2004 年报道了在材料烧结过程中发现在腔体中电场最大处和磁场最大处产生了不同的结果。

通过对微波效应（微波热效应和微波非热效应）的广泛研究，特别是对微波非热效应是否存在这一具有争议性问题的研究一直是从事微波、化学及其他相关领域学者的研究热点。虽然大量的研究者从模型模拟、理论推测和