

ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ МЕХАНИКИ им. А.Ю. ИШЛИНСКОГО
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

На правах рукописи

СТОРОЖЕВ ДМИТРИЙ АЛЕКСЕЕВИЧ

**ИССЛЕДОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНЫХ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ
ПРОЦЕССОВ В МЕХАНИКЕ СВЕРХЗВУКОВЫХ СТРУЙ И
ПЛАЗМЫ ГАЗОВОГО РАЗРЯДА**

01.02.05 – механика жидкости, газа и плазмы

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физ.-мат. наук, профессор,
академик РАН
Суржиков С.Т.

Москва 2018

Введение	4
Глава 1. Проблемы численного моделирования неравновесных физико-химических процессов в механике газовых разрядов	12
1.1. Обзор работ, посвященных численному моделированию неравновесных процессов в разрядах и струях	12
1.2. Обзор неравновесных физико-химических процессов с участием водорода в струях плазмы	20
1.3. Обзор неравновесных физико-химических процессов с участием водорода в механике газовых разрядов	21
Глава 2. Описание методов решения кинетического уравнения Больцмана для электронов.....	39
2.1. Формулировка кинетического уравнения Больцмана для электронов. Лоренцево приближение.	39
2.2. Расчет коэффициентов переноса и констант скорости в плазме на основе решения кинетического уравнения	43
2.3. Описание численных алгоритмов решения кинетического уравнения Больцмана для электронов	46
2.4. Результаты численного моделирования ФРЭЭ в молекулярном азоте .	51
2.5. Описание кинетической модели и предварительные результаты численного моделирования компонентного состава плазмы в молекулярном азоте	62
Глава 3. Кинетика плазмохимических процессов с участием водорода в механике пеннинговского разряда	77
3.1. Введение	77
3.2. Кинетические процессы в плазме газовых разрядов	78
3.3. Численное моделирование компонентного состава плазмы пеннинговского разряда	83
Глава 4. Согласованная физико-математическая модель динамики ионов и электронов в тлеющего разряде молекулярного азота и водорода	106
4.1. Численное моделирование двухмерной (2D) структуры тлеющего разряда в молекулярном азоте	106
4.2. Численное моделирование двухмерной (2D) структуры тлеющего разряда в молекулярном водороде	119

4.3. Численное моделирование электродинамической структуры пеннинговского разряда в молекулярном водороде.....	133
Глава 5. Численное моделирование истечения струи продуктов сгорания из сопла гиперзвукового прямоточного воздушно-реактивного двигателя (ГПВРД)	149
5.1. Описание двухмерной (2D) модели струи продуктов сгорания.....	149
5.2. Описание пространственной (3D) модели струи продуктов сгорания	159
5.3. Способы ускорения расчетов истечения струи продуктов сгорания: квазимаршевый метод и технология распараллеливания.....	168
Глава 6. Спектральная излучательная способность струи продуктов сгорания	172
6.1. Метод прямого статистического моделирования Монте-Карло для расчета спектральной излучательной способности струи	172
6.2. Тестирование разработанного компьютерного кода на примере расчета сигнатуры струй продуктов сгорания твердотопливных ракетных двигателей.....	183
6.3. Результаты расчета спектральной излучательной способности (сигнатуры) струи продуктов сгорания ГПВРД	195
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	197

Введение

Актуальность. Повышенный интерес к исследованию неравновесных физико-химических процессов с участием молекулярного и атомарного водорода, протекающих в газах и плазме, связан в последнее время с разработкой гиперзвуковых летательных аппаратов (ГЛА) и систем их обнаружения, созданием различных физических приборов и устройств, таких как газонаполненные нейтронные трубки и электрореактивные двигатели, а также исследованиями полярных струйных течений (джетов) в астрофизике. В основе описания перечисленных физических явлений и процессов лежат методы фундаментальной физико-химической механики. В силу того, что экспериментальные исследования таких процессов сопряжены с техническими и финансовыми трудностями, становится актуальной разработка компьютерных моделей, позволяющих выполнить численное моделирование изучаемых процессов и явлений.

Численное моделирование неравновесных физико-химических процессов в механике газового разряда или струях продуктов сгорания ракетных двигателей, требует не только решения уравнений механики газов и плазмы, но и адекватного описания системы на микроуровне: процессов взаимодействия электронов, возбужденных молекул атомов, ионов. При численном моделировании таких сложных физических явлений, как газовый разряд (в особенности, тлеющие и пеннинговские разряды), сверхзвуковое истечение струи плазмы из сопел электрореактивных двигателей, а также спектральной излучательной способности струи продуктов сгорания возникает необходимость определения неравновесной заселенности атомов и молекул, а также коэффициентов переноса сильно неравновесной электронной компоненты плазмы. В связи с этим возникает необходимость построения согласованных компьютерных моделей механики газа и плазмы, включающих все многообразие физико-химических процессов, протекающих в неравновесных системах. Такие модели включают в себя одновременно как систему уравнений движения для

газов (система уравнений Навье-Стокса) или плазмы (диффузионно-дрейфовая модель газового разряда), так и уравнения для описания физической кинетики (кинетическое уравнение Больцмана), систему уравнений поуровневой кинетики возбужденных частиц, методы прямого статистического моделирования Монте-Карло.

Вопрос о расчете спектральной излучательной способности струи продуктов сгорания, истекающей из сопла гиперзвукового летательного аппарата, возник при выполнении проекта фонда перспективных исследований «Создание комплексной системы моделирования перспективного гиперзвукового летательного аппарата» (шифр «Кодировщик»). Поэтому Глава 6, посвященная численному моделированию сигнатуры струи продуктов сгорания не имеет отношения к вопросу о численном моделировании неравновесных процессов в механике плазмы, но имеет отношение к вопросу о заселенности внутренних уровней молекул и атомов, без знания которых нельзя выполнить расчет спектральной сигнатуры струи продуктов сгорания. Рост производительности компьютеров и внедрение в практику исследований в компьютерной физике технологии параллельных вычислений, обуславливают актуальность построения пространственных расчетных моделей и методов, включающих в себя всё большее многообразие кинетических процессов.

Цель работы заключается в разработке компьютерной модели неравновесных физико-химических процессов в механике газовых разрядов и струй продуктов сгорания гиперзвуковых двигателей, а также создании вычислительных методов и компьютерных кодов для численного моделирования исследуемых процессов и явлений.

Основные задачи исследования:

1. Разработка согласованных моделей механики тлеющего и пеннинговского разрядов, основанных на решении системы двумерных (2D) уравнений диффузионно-дрейфовой модели,

решении кинетического уравнения Больцмана для электронов, и системы уравнений поуровневой кинетики.

2. Разработка кинетической модели для расчета концентрации молекулярных и атомарных ионов водорода в плазме пеннинговского разряда.
3. Реализация методов расчета коэффициентов переноса и констант скоростей в механике тлеющего разряда на основе согласованного решения кинетического уравнения Больцмана для электронов и системы уравнений поуровневой кинетики.
4. Разработка двумерных (2D) и трехмерных (3D) моделей истечения струи продуктов сгорания из сопла ГЛА на основе решения уравнений движения для вязкого теплопроводного химически реагирующего газа.
5. Реализация метода прямого статистического моделирования Монте-Карло для расчета спектральной излучательной способности струи продуктов сгорания, истекающей из сопла ГЛА.

Научная новизна работы заключается в следующем:

1. Разработана согласованная модель механики тлеющего разряда, основанная на решении двумерной диффузионно-дрейфовой системы уравнений для расчета электродинамической структуры разряда, решении кинетического уравнения Больцмана для функции распределения электронов для нахождения коэффициентов переноса в плазме и констант скорости, а также решении системы уравнений поуровневой кинетики для расчета компонентного состава плазмы тлеющего разряда.
2. Создана структурированная база данных констант скоростей и сечений рассеяния электронов на молекулах и атомах водорода для процессов, протекающих в плазме газовых разрядов. Разработаны подробная уровневая и упрощенная кинетические модели для расчета

концентрации молекулярных и атомарных ионов водорода в плазме пеннинговского разряда. Выполнены расчеты компонентного состава пеннинговского разряда с использованием разработанных кинетических моделей.

3. Проведены численные исследования электродинамической структуры тлеющего и пеннинговского разрядов с использованием решения системы уравнений механики сплошной среды. Выполненное исследование двумерной структуры нормального тлеющего разряда позволило установить ряд особенностей, связанных с физико-химической кинетикой. Было показано, что при давлении порядка нескольких Тор использование решения кинетического уравнения Больцмана при расчете 1-го коэффициента Таунсенда приводит к росту плотности ионов и электронов на катоде и в положительном столбе тлеющего разряда, что имеет большое практическое значение.
4. Разработана квазимаршевая методика решения системы уравнений движения вязкого теплопроводного химически реагирующего газа в задачах истекания струи продуктов сгорания из сопла ГЛА и разработана параллельная версия компьютерного кода, решающего данную задачу. Это позволило значительно сократить время расчетов.
5. Создана серия собственных (авторских) компьютерных кодов, предназначенных для численного моделирования неравновесных физико-химических процессов в механике газовых разрядов и струй продуктов сгорания (программы расчета: функции распределения электронов по энергиям и коэффициентов переноса в плазме газового тлеющего и пеннинговского разрядов, компонентного состава плазмы, двумерной электродинамической структуры разряда, параметров в струе продуктов сгорания ГЛА на основе двумерных и трехмерных моделей, спектральной излучательной способности струи продуктов сгорания ГЛА).

6. Проведены многопараметрические расчеты спектральной излучательной способности струй продуктов сгорания, истекающих из сопел твердотопливных и жидкостных ракетных двигателей, а также перспективных гиперзвуковых летательных аппаратов. Выполнено тестирование разработанных компьютерных кодов на примере сравнения с расчетными данными других авторов.

Основными защищаемыми положениями и результатами являются:

1. Согласованная модель физической механики нормального тлеющего разряда и результаты численного моделирования двумерной электродинамической структуры тлеющего разряда.
2. Поуровневая и упрощенная кинетические модели для описания компонентного состава плазмы пеннинговского разряда в молекулярном водороде. Результаты численного моделирования компонентного состава.
3. Методика расчета газодинамики истечения струи продуктов сгорания из сопла перспективного ГЛА, а также направленной спектральной излучательной способности струй продуктов сгорания. Результаты численного моделирования сигнатуры струй продуктов сгорания.

Практическая значимость. Построенные в работе модели и разработанные методы расчета могут быть использованы для численного моделирования неравновесных физико-химических процессов в механике газовых разрядов и струй продуктов сгорания, истекающих из сопел жидкостных и твердотопливных двигателей. Созданный при выполнении работы компьютерный код, предназначенный для расчета спектральной излучательной способности (сигнатуры) струй продуктов сгорания, позволяет решать целый ряд прикладных задач. Результаты исследования могут также использоваться при верификации процедур численного расчета в соответствующих задачах.

Научные исследования, проведенные в диссертационной работе, осуществлялись в рамках проектов РФФИ-13-01-00537, РФФИ-16-01-00379, РНФ-16-11-10275, а также программы фундаментальных исследований Президиума РАН «Фундаментальные проблемы механики взаимодействий в технических и природных системах, материалах и средах», программы фундаментальных исследований Отделения энергетики, машиностроения, механики и процессов управления РАН «Физико-химическая механика неравновесных систем», в рамках проекта Фонда перспективных исследований РФ «Создание комплексной системы моделирования перспективного гиперзвукового летательного аппарата» (шифр «Кодировщик»).

Результаты диссертации подтверждаются физической обоснованностью постановок задач и строгим аналитическим характером их рассмотрения с применением современных теоретических концепций и математических средств физической и химической механики, сравнением собственных численных результатов с расчетами других авторов, а также соответствием расчетных и экспериментальных данных.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались и обсуждались на всероссийских и международных профильных научных конференциях и семинарах:

1. 52nd AIAA Aerospace Sciences Meeting, 13 - 17 January 2014, National Harbor, Maryland.
2. 46th AIAA Thermophysics Conference, AIAA Plasmadynamics and Lasers Conference, 22 – 26 June 2015, Dallas, Texas
3. 55th AIAA Aerospace Sciences Meeting, AIAA SciTech Forum, Gaylord Texan, Grapevine, Texas.
4. 9th international Conference on Plasma Assisted Technologies, LLC, Saint-Petersburg, 2014.
5. Международная Звенигородская конференция по физике плазмы и УТС, Звенигород, 2014, 2015, 2016

6. Школа-семинар «Аэрофизика и физическая механика классических и квантовых систем» (АФМ), Москва, Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, 2013, 2014, 2015, 2016, 2017.
7. Ежегодная научная конференция МФТИ, Москва-Долгопрудный, Московский Физико-Технический Институт, 2011 – 2017 гг.
8. Научно-техническая конференция молодых ученых «ВНИИА», Москва, 2015, 2016 гг.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 10 статей, 16 тезисов международных и всероссийских конференций, 6 из которых индексированы в базах данных «Сеть науки» (Web of Science) и «Скопус» (Scopus), и входят в список рекомендуемых изданий Высшей аттестационной комиссии РФ. Список работ приведен в конце автореферата.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, 6 глав, заключения, списка литературы и приложения. Общий объем работы составляет 209 страниц, включая 86 рисунков и 30 таблиц. Список литературы содержит 157 наименований.

Во *введении* обоснована актуальность темы исследований. Сформулирована цель и кратко изложена структура диссертации.

В *первой главе* изложен обзор работ, посвященных численному моделированию неравновесных физико-химических процессов с участием водорода, протекающих в плазме тлеющего и пеннинговских разрядов, плазменных струях, а также дано описание кинетических моделей, используемых в данных работах.

Во *второй главе* приводится описание двух методов решения кинетического уравнения Больцмана для функции распределения электронов по энергиям. Приводятся результаты численного моделирования функции распределения электронов, а также коэффициентов переноса в плазме молекулярного азота. Выполнены расчеты констант скоростей возбуждения различных колебательных и электронных степеней свободы молекулы, 1-го коэффициента Таунсенда,

рассчитаны заселенности колебательных уровней основного электронного состояния молекулы азота. Выполнена верификация изложенной модели.

В третьей главе рассмотрены вопросы, связанные с численным моделированием компонентного состава плазмы пеннинговского разряда в молекулярном водороде. Описываются подробная уровневая и упрощенная кинетические модели для расчета компонентного состава плазмы пеннинговского разряда. Выполнен анализ влияния различных механизмов в кинетической схеме на атомно-молекулярный состав плазмы. Приводятся предварительные результаты численного моделирования с использованием нульмерной кинетической модели (расчет в элементарном физическом объеме без учета потоков массы и энергии через его границы).

Четвертая глава посвящена разработке компьютерных моделей тлеющего и пеннинговского разрядов, основанных на согласованном решении уравнений механики газового разряда (диффузионно-дрейфовая модель) и уравнений, описывающих физико-химические процессы, протекающие в плазме разряда.

В пятой главе изложена модель, описывающая механику струи продуктов сгорания, основанная на решении уравнений движения для вязкого, теплопроводного, химически-реагирующего газа.

В шестой главе описываются результаты численного моделирования спектральной излучательной способности (сигнатуры) струи продуктов сгорания на примере модельных и реальных струй твердотопливных тактических ракет, а также для струи продуктов сгорания перспективного гиперзвукового летательного аппарата.

В заключении кратко формулируются основные выводы, полученные в диссертации.

Глава 1. Проблемы численного моделирования неравновесных физико-химических процессов в механике газовых разрядов

1.1. Обзор работ, посвященных численному моделированию неравновесных процессов в разрядах и струях

Первые попытки решить кинетическое уравнение Больцмана были предприняты Лоренцем [1], который рассматривал системы, находящиеся в состояниях, близких к ЛТР. Он первым отразил тот факт, что ФРЭЭ в небольших полях является почти изотропной, а отклонения функции распределения от максвелловской определялись малыми поправками, пропорциональными косинусу угла между скоростью электрона и напряженностью электрического поля. В многочисленных, развитых впоследствии модификациях этого разложения [2]–[10], было показано, что это разложение быстро сходится и в большинстве случаев можно ограничиться первыми двумя членами разложения ФРЭЭ. Такое «двучленное приближение» имеет вид:

$$f(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) = f_0(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) + f_1(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) \cos \theta.$$

В работах [11], [12] рассматривается решение кинетического уравнения Больцмана для электронов в электрическом и магнитном полях методом сферических гармоник. Функция распределения в данной работе разлагается по сферическим функциям: $f(\mathbf{v}, \mathbf{r}) = \sum_l f_l(\mathbf{v}, \mathbf{r}) P_l(\cos \theta)$, $P_l(x)$ - полиномы Лежандра. При этом функция $f_0(\mathbf{v}, \mathbf{r})$ уже не считается максвелловской и должна рассчитываться из решения уравнения Больцмана. В работе получены дивергентные члены в уравнении Больцмана, обусловленные электрическим и магнитным полем, для используемого разложения ФРЭЭ, а также выведены формулы для электронных коэффициентов переноса. Важным результатом работ [11], [12] является вывод выражений для упругих и неупругих интегралов столкновения в правой части уравнения Больцмана, позволяющие рассчитать неравновесную ФРЭЭ.

В работе [13] сформулировано кинетическое уравнение Больцмана для электронов в высокочастотном и постоянном электрическом поле. Рассматриваются следующие предельные случаи:

- 1) плотности электронов, ионов и возбужденных молекул много меньше плотности молекул в основном состоянии.
- 2) случай, когда энергии электронов небольшие, так что сечения упругих столкновений намного больше сечений неупругих процессов
- 3) линейные размеры области горения разряда много больше длины свободного пробега при упругих столкновениях
- 4) частота электрического поля намного больше минимальных частот, определяемых соударениями, типом газа и линейным размером области горения разряда.

При этом особое внимание в работе уделяется выводу неупругих интегралов столкновения в правой части уравнения Больцмана. Однако исследование влияния неупругих столкновений на ФРЭЭ проводится для модельных сечений столкновения: сечения полагались постоянной функцией для упругих процессов, и ступенчатой функцией для неупругих процессов. Полученные в [8] результаты, широко использовались в последующих работах для детального анализа ФРЭЭ в неравновесной плазме.

В работе [14] показано, что при рассмотрении электронного компонента слабоионизированной плазмы гидродинамическое приближение применимо, только если упругие потери при столкновениях электрон-нейтрал существенно превышают неупругие. В этом случае скорость и температура плазмы однозначно определяются внешним электрическим полем и характеристиками нейтрального компонента, поэтому гидродинамическая система уравнений переноса сводится к одному модифицированному уравнению непрерывности. В работе выводится уравнение для функции распределения электронов по энергиям для модельного интеграла столкновений, выведены коэффициенты переноса для простейшей степенной зависимости сечения упругих столкновений

от скорости, а также в случаях, если сечения или частоты соударений от скорости не зависят. Также автором получено уравнение переноса для слабоионизированной плазмы в магнитном поле, из которого следует, что магнитное поле влияет только на поперечные движения. Приведенные в статье уравнения используются для исследования устойчивости газового разряда. В работе показано, что для неустойчивости необходимо, чтобы сечение упругих соударений падало с ростом скорости электронов.

В работе [6] показано, что в уравнении переноса электронов в неравновесной слабоионизированной плазме необходимо учитывать потоки, вызванные градиентами (поля, плотности газа), а также временными производными всех параметров от которых зависит локальная функция распределения электронов. Поэтому при выводе уравнений переноса авторами учитывались не только процессы нагрева электронов в поле и охлаждения при столкновениях, но и изменение числа частиц, диффузионные и дрейфовые потоки, работа поля над диффузионным потоком. Выведенное в работе уравнение переноса применено для решения ряда конкретных задач (о прилипательной неустойчивости и неустойчивости, обусловленной отрицательной дифференциальной проводимостью газовой плазмы). Указаны общие рецепты вычисления транспортных коэффициентов и получены их явные выражения для модельных интегралов столкновения.

В работе [15] выведено модифицированное уравнение переноса электронов в неравновесной слабоионизированной плазме в электрическом и магнитном полях. Указаны формулы для определения электронных коэффициентов переноса. На основе уравнения баланса средней энергии электронов развит приближенный подход для вычисления этих коэффициентов. Полученное уравнение переноса использовано для исследования устойчивости слабоионизированной неравновесной плазмы.

В работе [16] рассмотрен предел сильного магнитного поля, когда циклотронная частота электронов велика по сравнению с частотой передачи

импульса электронов. Получены явные выражения для электронных коэффициентов переноса в модельном случае, когда интеграл столкновений имеет дивергентный вид, а сечения рассеяния электронов на нейтральных частицах являются степенными функциями от скорости электронов.

В работе [17] функция распределения электронов по энергиям рассчитывается из решения уравнения Больцмана как функция энергии и пространственной координаты (одномерная задача для однородного потока электронов, адсорбирующихся на аноде). В работе показано, что функция распределения электронов, а также кинетические параметры (подвижность, коэффициент продольной диффузии) сильно зависят от расстояния до электрода, а плотность электронов не может быть с достаточной точностью получена из решения уравнения непрерывности. При этом, полученные авторами [17] коэффициенты продольной диффузии верны для случая небольших градиентов плотности электронов, а решаемое уравнение включало интегралы столкновения только для процессов упругого рассеяния.

В работе [18] выполняется исследование продольной и поперечной диффузии электронов, ускоряемых электрическим полем. В работе показывается, что коэффициенты диффузии для продольного и поперечного движения электронов в поле значительно отличаются. Для случая линейной зависимости упругого сечения от энергии соотношение между продольной и поперечной составляющими коэффициента диффузии постоянно и равно 1:5.

В работе [19] выполнено сравнение результатов расчета ФРЭЭ в двух и шести членном приближении, а также решением, получаемым методом Монте-Карло для электронов в азоте. В решаемом уравнении помимо упругих учитывались также неупругие потери энергии электронов на возбуждение молекул азота. Авторами отмечается, что при небольших E/N (1-200 Тд), использование двух членов в разложении функции распределения дает незначительную ошибку в рассчитанных коэффициентах переноса, а результаты хорошо согласуются с решением, даваемым методом Монте-Карло. При этом

ошибка в рассчитанных коэффициентах переноса составляет не более 5% и возрастает с увеличением доли неупругих потерь энергии электронов.

В работе [20] исследуется влияние анизотропного рассеяния электронов на кинетические параметры азотной плазмы. Рассматривается решение уравнения Больцмана для электронов в диапазоне значений E/N : 500-1500 Тд, когда средняя энергия электронов равна более, чем 5 эВ. При этом интегралы столкновения в правой части уравнения Больцмана рассчитывались с использованием набора упругих и неупругих сечений для анизотропного рассеяния электронов. В данной работе авторами было показано, что использование новых сечений не оказывает заметного влияния на решение уравнения Больцмана при $E/N < 500$ Тд, однако при более высоких значениях E/N учет анизотропного рассеяния приводит к значительным изменениям функции распределения (сильно растет число высокоэнергичных электронов в «хвосте распределения»), и, следовательно, кинетических параметров плазмы. Авторами также отмечается, что при высоких значениях E/N лоренцевское приближение функции распределения дает значительную ошибку при расчете энергетического спектра электронов по сравнению с методом, учитывающим 6 членов в разложении ФРЭЭ. Помимо этого, при высоких значениях энергии электронов значительное влияние на их энергетический спектр оказывают процессы ионизации. В работе [20] описаны две модели учета роста плотности электронов, которые позволяют получить коэффициенты ионизации, согласующиеся с экспериментальными данными.

Численное решение кинетического уравнения Больцмана для ФРЭЭ с учетом всех возможных процессов передачи энергии от электронов к молекулам и атомам позволяет получить достоверные значения кинетических параметров и плотности электронов в плазме. Особенно это необходимо при моделировании плазмы тлеющего разряда. В работе [21] показано, что для условий, характерных для плазмы положительного столба тлеющего разряда ($p \sim 10$ Торр, $T_e \sim 2-3$ эВ), ФРЭЭ носит существенно немаксвелловский характер, а её форма полностью

определяется неупругими электрон-молекулярными столкновениями. Полученные в работе результаты основаны на решении уравнения Больцмана с учетом имеющихся данных о сечениях колебательного и электронного возбуждения молекул. Авторами утверждается, что при энергиях электронов более 2 эВ ($E/N \sim 200$ Тд) доминирующими процессами в формировании функции распределения являются (более 80% теряемой электронами энергии) процессы электронного возбуждения молекул (а при меньших энергиях – колебательного).

В работе [22] исследуется влияние соударений второго рода и колебательной температуры молекул газа на функцию распределения электронов и кинетические параметры плазмы. Авторами показано, что учет зависимости функции распределения от колебательной температуры порождает новые члены в разложении коэффициентов переноса, пропорциональные градиенту колебательной температуры. В частности, рассчитанные новые коэффициенты диффузии, полученные в рамках построенной модели, по значению одного порядка с поперечным коэффициентом диффузии и сильно зависят от колебательной температуры молекул газа.

В работах [23], [24] исследуется нелокальная кинетика электронов в плазме тлеющего разряда в неоне. В работе [24] описывается два метода решения уравнения Больцмана в просторанственно неоднородной плазме. Один из них применяется для расчета кинетики медленных электронов в положительном столбе тлеющего разряда, функция распределения по энергиям которых близка к изотропной. При этом решаемое уравнение осредняется по пространству, а функция распределения рассчитывается в разных точках поперечного сечения разряда в неоне. Второй метод предназначен для описания кинетики электронов в приэлектродных областях разряда. Электроны вблизи катода разделены на две группы: горячие, энергии которых намного больше характерных потерь при неупругих столкновениях, и холодные, кинетика которых хорошо описывается в рамках гидродинамического приближения. Кинетика «горячих» электронов описывается уравнением Больцмана с интегралом столкновений в форме

Фоккера-Планка. Предполагается, что функция распределения электронов сильно неизотропна, благодаря преимущественному рассеянию электронов на малые углы, а благодаря малой доли теряемой при столкновениях энергии, все процессы рассеяния горячих электронов считались квазиупругими. Полученные в работе результаты позволяют описать отдельные области сложной структуры катодного слоя (фарадеево темное пространство). Аналитическое решение уравнения Больцмана, полученное в работе, хорошо согласуется с результатами расчета методами Монте-Карло.

В работе [25] описан метод решения уравнения Больцмана, с учетом электрон-молекулярных и электрон-электронных столкновений. Для расчета ФРЭЭ в молекулярном азоте используется база данных из 23 сечений рассеяния, описывающих возбуждение колебательных и электронных уровней азота. Полученные авторами результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными, а используемые в работе сечения использовались в последующих работах [26]–[28] для детального анализа кинетических процессов в плазме тлеющего разряда.

В работах [26]–[28] выполнено детальное исследование кинетики частиц в плазме тлеющего разряда на основе решения уравнения Больцмана совместно с системой уравнений поуровневой кинетики молекул азота. В данных работах учитывается влияние на ФРЭЭ соударений электронов с возбужденными атомами. При увеличении заселенности колебательных уровней молекул (или колебательной температуры) в распределении значительно растет число электронов с энергией более 3 эВ. Результаты расчетов показывают хорошее согласие с экспериментальными данными, полученными методами спектроскопии КАРС в работе [26] и результатами [29].

В работе [30] представлен метод высокого порядка решения уравнения Больцмана. Авторами используется разложение функции распределения по 8 полиномам Лежандра. Полученная в работе система дифференциальных уравнений решается методом Галеркина. Разработанный метод применялся

авторами к решению кинетического уравнения Больцмана для электронов в азоте и парах ртути с учетом изотропного и анизотропного рассеяния при упругих и неупругих соударениях. При увеличении E/N различие между результатами работы [30] и результатами, даваемыми лоренцевым приближением ФРЭЭ, усиливается. Значительно увеличивается число высокоэнергетических электронов в спектре.

Особенный интерес представляет влияние магнитного поля на низкотемпературную плазму [31]. В работе [31] исследуется влияние неоднородного по пространству и зависящего от времени электрического и магнитного поля. В работе считалось, что спектр электронов близок к максвелловскому. Кинетическое уравнение Больцмана решается авторами в гидродинамическом приближении, а функция распределения раскладывается по полиномам Сонина. В работе исследуется влияние амплитуды, частоты, ориентации и фазового сдвига на кинетические параметры плазмы в CF_4 . Авторами описывается эффект циклотронного резонанса – явление поглощения электронами энергии микро-частотного неоднородного электромагнитного поля в случае, если циклотронная частота электронов равна частоте поля. В работе отмечается, что значение этой энергии уменьшается с увеличением амплитуды магнитного поля, и растет с увеличением разности фаз электрического и магнитного полей. Авторами также объясняется влияние разности фаз на энергию электронов и коэффициент ионизации. В случае малой разности фаз электроны не могут получить энергию от поля, так как магнитное поле «замораживает» движение электронов и, поэтому, их энергия значительно уменьшается. При увеличении разности фаз этот эффект уменьшается, так как магнитное поле мало, когда амплитуда электрического поля достигает максимума. При уменьшении разности фаз, значения коэффициентов ионизации сильно уменьшаются, а при увеличении становятся сильно модулированной функцией. Из этого следует, что функция распределения также должна быть неизотропной функцией.

1.2. Обзор неравновесных физико-химических процессов с участием водорода в струях плазмы

Интерес к исследованию неравновесных физико-химических процессов в струях водородной плазмы [32], [33] связан в первую очередь с разработкой таких приборов, как холловские двигатели, применяемые в аэрокосмической промышленности, источники ионов, применяемые при разработке различных электрофизических приборов (например, нейтронные трубки), а также плазменных приборов, применяемых в медицине.

В работе [34] описываются различные численные методики для описания процессов в ионных двигателях. В работе исследуются орбитальные ионные двигатели, преимущественно применяемые в космических спутниках. Авторами утверждается, что в зависимости от режима работы ионного двигателя, может потребоваться как гидродинамический, так и кинетический подход к описанию неравновесных физико-химических процессов, протекающих в струе плазмы. В работе [35] приводятся результаты численного моделирования неравновесной струи плазмы в молекулярном водороде, истекающей из сопла ионного двигателя. Численное моделирование процессов переноса в струе, а также неравновесных физико-химических процессов, протекающих в плазме водорода, проводилось с использованием метода прямого статистического моделирования Монте-Карло. В работе отмечается, что используемая в работе модель описания неравновесной заселенности, позволяет адекватно описывать плазмохимические процессы с участием водорода в струе плазмы. Тем не менее, она дает неудовлетворительное согласие с экспериментальными данными по концентрации атомов водорода и электронов в плоскости сопла ионного двигателя. Авторами также отмечается, что «континуальные» модели тоже позволяют адекватно описывать истечение плазменной струи, если добавить в них модель колебательной релаксации молекулярного водорода, а также ввести в модель отдельное уравнение сохранения поступательной энергии для электронов.

В работах [36]–[40] исследовалась структура сверхзвуковой плазменной струи благородных газов, а также водорода и аргоно-водородной смеси, истекающей в откачанную до 20-100 Па камеру. Авторами проводились как экспериментальные, так и численные эксперименты. В работе [41] обсуждаются результаты экспериментальных измерений, а также выполнено численное моделирование компонентного состава струи аргоно-водородной плазмы на основе квази-одномерной модели. Авторами отмечается очень хорошее согласие расчетных и экспериментальных данных. В работе [36] экспериментально исследовался компонентный состав струи водородной и аргоно-водородной плазмы. Авторами обсуждаются механизмы ионизации и рекомбинации водорода в струе плазмы. Отмечается, что в струе количество атомарных ионов водорода падает на 3-4 порядка. Авторами отмечается, что столь низкое количество атомарных ионов водорода в струе, по сравнению с концентрацией атомарных ионов в источнике плазмы, объясняется наличием процесса перезарядки, т.е. обмена зарядом атомарного иона водорода с колебательно-возбужденной молекулой водорода. В статье также говорится, что данный механизм может быть важным источником молекулярных ионов в струе плазмы.

1.3. Обзор неравновесных физико-химических процессов с участием водорода в механике газовых разрядов

Интерес к исследованию кинетики молекулярного водорода и его изотопов в низкотемпературной плазме газовых разрядов, таких как Пеннинговский, тлеющий и высокочастотный разряды, связан с разработкой различных электрофизических приборов на их основе (ионные двигатели, генераторы нейтронов, источники ионов). Большое количество экспериментальных и теоретических данных по сечениям рассеяния электронов на атомах и молекулах водорода и его изотопов [42]–[44], появившихся в последнее время, а также растущая производительность вычислительной техники позволяют создавать и развивать компьютерные модели разрядов, учитывающих всю сложность и

многообразие физико-химических процессов, протекающих в области горения разряда.

Упрощенная радиационно-столкновительная модель (см. Табл. 1), основанная на системе кинетических «поуровневых» уравнений (учитывается 28 возбужденных энергетических уровней) для колебательных состояний основного электронного терма молекулы H_2 , а также включающая различные механизмы ионизации и диссоциации представлена в работе [45]. На основе разработанной авторами модели с учетом предположения о квазистационарности кинетических процессов и «равновесности» функции распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ), авторами рассчитываются константы скорости ионизации и диссоциации молекулы водорода электронным ударом в широком диапазоне концентраций нейтральных молекул газа и температуры электронов, анализируются различные механизмы ионизации и диссоциации. В работе использовались доступные в литературе сечения рассеяния электронов на молекулах в основном электронном состоянии, а также описан метод оценки сечений возбуждения с более высоких ($n > 2$) энергетических состояний. Авторами утверждается, что основным механизмом ионизации в плазме молекулярного водорода является прямая ионизация электронным ударом, а основным механизмом диссоциации является диссоциация из нестабильного электронного состояния $H_2(b^3\Sigma_u^+)$, также возбуждаемого электронами.

В работе [46] выполнено самосогласованное моделирование на основе метода Монте-Карло характеристик разряда, образующегося в радиально сходящемся цилиндрическом устройстве инерциального термоядерного синтеза. Уравнения разработанной авторами модели являются двухмерными и не зависят от времени. Учитывается компонентный состав плазмы и столкновения с нейтральными молекулами газа. Кинетическая схема, описанная в работе, включает столкновения только с нейтральными молекулами газа, при этом моделируются только столкновения, имеющие наибольшие вероятности (сечения рассеяния), а

обратные реакции не учитываются. Описанные в работе процессы включают следующие типы взаимодействия: электрон-молекула, атом-ион, молекула-ион, столкновения с быстрыми (частицы с высокой энергией) атомами и молекулами (Табл. 2). Основная особенность предложенной в [46] модели заключается в учитываемых в кинетической схеме реакциях с участием быстрых частиц. Авторами было показано, что ядерные реакции в описываемом устройстве, возникают не только с участием ионов, но и с участием высокоэнергетических нейтральных молекул и атомов (73-94% всех процессов термоядерного синтеза).

В работе [47] рассчитывалась функция распределения электронов по энергиям в плазме источника Пеннинга на основе решения кинетического уравнения Больцмана в Лоренцевом приближении. Авторами отмечается, что в случае высокой степени ионизации плазмы распределение электронов становится равновесным, поэтому в этом случае допустимо использовать функцию распределения Максвелла для расчета констант скоростей и коэффициентов переноса. В случае же, если плазма слабоионизованная, имеет место отклонение ФРЭЭ от равновесной, поэтому при моделировании кинетических процессов необходимо решать уравнение Больцмана. При расчете функции распределения авторами учитывались следующие виды взаимодействия частиц: упругие $e-H_2$ столкновения, упругие $e-e$ столкновения, неупругие и сверхупругие $e-H_2$ (Табл. 3). В работе показано, что высокоэнергетический хвост функции распределения приходит в стационарное состояние за время не более, чем за 0.5 мкс, в то время как в низкоэнергетической области энергетического спектра стационарные значения достигаются за время 50 мкс. В работе также исследовалось влияние наличия атомарного водорода на ФРЭЭ. Было показано, что присутствие атомарной примеси в молекулярном водороде приводит к обогащению электронами низкоэнергетической ($\epsilon < 5$ eV) и высокоэнергетической области спектра ($\epsilon > 12$ eV) и опустошению в области средних ($5 < \epsilon < 12$ eV) энергий.

В работах [42] представлены «поуровневые» сечения рассеяния для следующих процессов: $e\text{-H}_2$, H-H_2 , $e\text{-D}_2$, D-D_2 (Табл. 4). Представленные в работе сечения были рассчитаны с использованием квазиклассического приближения, включают также ступенчатые E-V процессы возбуждения и диссоциации молекулярного водорода (в том числе проходящие через возбуждение синглетных состояний $B^1\Sigma_u^+$ и $D^1\Pi_u$). Авторами отмечается, что описанные в работе механизмы возбуждения, могут играть определяющую роль в заселении колебательных уровней H_2 . В то же время описанный в работе ступенчатый механизм диссоциации с участием колебательно-возбужденных молекул играет существенную роль только при очень высоких колебательных квантовых числах.

В работах [48], [49] выполнено двумерное численное моделирование замагниченной плазмы в разряде низкого давления, основанное на «гибридном» кинетическом подходе к решению уравнения Больцмана. Расчеты были выполнены для диапазона давлений 1–2 Па, когда длина свободного пробега частиц сравнима с характерным размером области горения разряда. В предложенном авторами подходе предлагается разделить область интегрирования уравнения Больцмана на две подобласти: низкоэнергетическую, где применялось «классическое» нелокальное приближение, и область высоких энергий, где решалось дифференциальное уравнение в частных производных в зависимости от двух пространственных координат и полной энергии частиц. Сравнение полученных авторами результатов показывает удовлетворительное согласие с экспериментальными данными для диапазона давлений $p=5\text{-}20\text{ mTorr}$.

В работе [50] представлена кинетическая схема неравновесных химических процессов в сильноионизованной водородной плазме импульсного разряда. Предложенная авторами кинетическая схема включает процессы взаимодействия электронов с атомами и молекулами (включая систему процессов колебательного возбуждения молекул), колебательную кинетику молекул H_2 , а также химические реакции с участием атомарного водорода,

положительных и отрицательных ионов (Табл. 5). В работе показано, что в рассматриваемых условиях нейтральный газ нагревается до относительно высоких температур (по порядку становится равна температуре электронов), что происходит в основном за счет диссоциативного возбуждения молекул электронным ударом, а степень диссоциации достигает $[H]/[H_2]=1$, а доля атомарных ионов равна $[H^+]/[H_2^+]>0.9$.

В работах [51], [52] описывается база данных неупругих сечений рассеяния электронов на колебательно возбужденных молекулах водорода и его изотопах. База данных включает следующие неупругие процессы: диссоциативное и недиссоциативное возбуждение электронным ударом, ионизация электронным ударом, ступенчатые процессы колебательного возбуждения и диссоциации, диссоциативное прилипание и резонансный захват электрона (Табл. 6). Часть представленных в работе данных по сечениям рассеяния была взята из имеющихся литературных данных, а часть рассчитаны теоретически. В частности, сечения диссоциативного прилипания и колебательного возбуждения были рассчитаны в рамках резонансной теории.

В работах [53]–[57] выполнено самосогласованное численное моделирование, основанное на решении кинетического уравнения Больцмана для электронов и системы уравнений для заселенностей колебательных уровней молекул водорода. Авторами рассчитывались коэффициенты переноса, константы скорости возбуждения и диссоциации, а также доли энергии, вкладываемой частицами в возбуждение внутренних степеней свободы молекул, ионизацию, диссоциацию и нагрев молекул газа. Авторами отмечается, что рассчитанные в рамках разработанной модели степени диссоциации и колебательной температуры составляют $\frac{[H]}{[H]+[H_2]} \approx 0.03$, $\theta \approx 1300$ К при токе разряда $I=1$ А и $\frac{[H]}{[H]+[H_2]} \approx 0.3$, $\theta \approx 2200$ К при токе разряда $I=10$ А и

находятся в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными. Кинетическая схема, используемая в работе [53], представлена в Табл. 7.

В работе [58] выполнено *ab-initio* моделирование источника отрицательных ионов. Описанная в работе модель основана на согласованном решении кинетического уравнения Больцмана для электронов и уравнений колебательной кинетики молекулярного водорода для расчета процессов происходящих в области горения разряда, а также моделирования «послеразрядных» процессов на основе метода «частица в ячейке» и расчета столкновений методом Монте Карло. Отдельно в работе обсуждаются вопросы, связанные с кинетикой возбуждения триплетных состояний молекулы H_2 . Используемая в работе кинетическая схема приведена в Табл. 8.

В работе [59] описывается самосогласованная модель, основанная на решении системы уравнений колебательной кинетики, уравнений химической кинетики, а также уравнения Больцмана для электронов. Авторами работы были рассчитаны коэффициенты переноса в плазме молекулярного водорода, доли энергии, вкладываемые электронами в поступательные, колебательные и вращательные степени свободы молекул, а также константы скорости диссоциации. Было показано, что колебательная температура молекул нейтрального газа растет до нескольких тысяч кельвинов, а сверхупругие столкновения отвечают за формирование высокоэнергетического хвоста функции распределения электронов, определяющего константы скорости возбуждения электронных термов молекулы водорода. Сообщается также о существенном влиянии V-T процессов на формирование колебательной функции распределения молекулярного водорода; благодаря V-T процессам сильно уменьшается количество молекул с высокими колебательными квантовыми числами. Это по мнению авторов является причиной того, что диссоциации в плазме молекулярного водорода происходит в основном электронным ударом, в отличие, например, от плазмы в N_2 , где определяющую роль играют процессы V-V и V-T диссоциации.

В работе [60] предложен метод моделирования поведения заряженных частиц, основанный на решении уравнения Фоккера-Планка, в источнике ионов на основе электронного циклотронного резонанса. Авторами предлагается новый метод решения интегро-дифференциального уравнения Фоккера-Планка. В работе показано, что полученные расчетные данные удовлетворительно согласуются с экспериментальными результатами. Однако предложенная модель не позволяет выполнить расчеты распределения заряда ионов, а также выполнить расчет распределения заряженных частиц согласованно с расчетом потенциала электрического поля.

Численное моделирование процессов переноса атомарного водорода в ионном источнике на основе трехмерного моделирования методом Монте-Карло выполнено в работах [61], [62]. Моделирование было выполнено для ионного источника «JAEA». В работе рассчитывались концентрации атомарного водорода, образующегося в газоразрядной плазме. Авторами было показано, что ФРЭЭ в таком источнике может быть аппроксимирована двух-температурным Максвелловским распределением. При этом высокоэнергетический «хвост» распределения оказывает существенное влияние на скорость процессов диссоциации водорода и образования отрицательных атомарных ионов H^- . Кинетическая схема, используемая в работе [61], представлена в Табл. 9.

Численное моделирование источника ионов «JAEA» на основе метода Монте-Карло также выполнено в работе [63]. В предложенной модели (см. Табл. 10) столкновения электронов между собой моделировалось с использованием модели «парных столкновений», а столкновения с молекулами водорода методом «null-collision». В работе отмечается, что рассчитанная ФРЭЭ состоит преимущественно из двух групп электронов: низкоэнергетической с $T_e \sim 3 \text{ eV}$, и высокоэнергетической с $T_e \sim 20 \text{ eV}$.

В работе [64], [65] описана модель ионного источника, включающая плазмохимию, поглощение плазмой энергии электромагнитного поля, движение заряженных частиц в скрещенном электромагнитном поле. Различные сорта

частиц описываются уравнениями сохранения непрерывности, сохранения момента и энергии, включая магнитное поле, инерцию и вязкость. Предполагается, что электроны имеют Максвелловское распределение по энергиям. Электростатическое взаимодействие электронов и ионов описывается уравнением Пуассона. В работе показано, что температура электронов в разрядной камере достигает 17 eV. При этом температура нейтральных молекул газа H_2 составляет 0.1 eV, а температура атомов H равна 1 eV. В работе выполнены расчеты пространственного распределения молекулярных ионов и молекул нейтрального газа. Было показано, что относительное количество ионов H_3^+ мало по сравнению с концентрацией ионов H^+ и H_2^+ во всей области горения разряда.

В работе [66] рассчитывался химический состав плазмы молекулярного водорода в разряде постоянного тока. Авторами проводились расчеты концентрации атомов H, а также различных ионов H_2^+ , H_3^+ , H^+ на основе нульмерной кинетической модели (используемая авторами кинетическая схема представлена в Табл. 11), а также проводилось сравнение с экспериментальными измерениями химического состава методами оптической спектроскопии и масс-спектрометрии. Авторами отмечается, что в рассматриваемых условиях степень ионизации составляет 10^{-4} , степень диссоциации при этом равна 0.1, а основным ионом является H_3^+ , за исключением случая очень низких давлений (в этом случае основным ионом является H_2^+).

В работах [67], [68] методом Монте Карло было рассчитано равновесное колебательное распределение молекул H_2 в области горения разряда и в области извлечения ионов высокочастотного источника отрицательных ионов. В работе показано, что определяющую роль в заселении нижних колебательных состояний молекул играют Vt -VT, AV и eV процессы, в то время как верхние колебательные состояния заселяются преимущественно за счет eV, AV, и sV₂ процессов (см. Табл. 12).

В работах [69]–[72] получены экспериментальные данные по измерению степени диссоциации, колебательной, вращательной и поступательной температур молекулярного водорода в источниках ионов. В работе также исследовалось влияние изотопного состава плазмы на концентрацию ионов, извлекаемых из источника. В частности авторами было показано, что для одних и тех же условий горения разряда концентрация ионов D^+ в области извлечения ионов выше, чем концентрация ионов H^+ .

Табл. 1 Кинетическая схема из работы [45].

Компоненты	Реакции	Рассматриваемые в работе условия
<p>Синглетные состояния $B^1\Sigma_u^+, C^1\Pi_u, E, F^1\Sigma_g^+$</p> <p>Триплетные состояния $b^3\Sigma_u^+, c^3\Pi_u, a^3\Sigma_g^+$</p> <p>Колебательно-возбужденные состояния $n=28$</p> <p>Ионы H_2^+, H^+</p> <p>Атомы H</p>	<p>ИОНИЗАЦИЯ</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. $H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow H_2^+(X^2\Sigma_g^+) + e + e$ 2. $H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow H_2^* + e$ $H_2^* + e \rightarrow H_2^{**} + e$ $H_2^{**} + e \rightarrow H_2^+(X^2\Sigma_g^+) + e + e$ 3. $H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow H(1s) + H^+ + e$ 4. $H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow H(1s) + H^* + e$ $H^* + e \rightarrow H^{**} + e$ $H^{**} + e \rightarrow H^+ + e + e$ <p>ДИССОЦИАЦИЯ</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. $H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow H_2(b^3\Sigma_u^+) + e$ $H_2(b^3\Sigma_u^+) \rightarrow H(1s) + H(1s)$ 2. $H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow H_2^* + e$ $H_2^* + e \rightarrow H_2(b^3\Sigma_u^+) + e$ $H_2(b^3\Sigma_u^+) \rightarrow H(1s) + H(1s)$ 3. $H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow H(1s) + H^* + e$ 4. $H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow H(1s) + H^* + e$ $H^* + e \rightarrow H(1s)$ $H_2 + e \rightarrow H(1s) + H^+ + e + e$ 	<p>Температура электронов: $T_e = 5-100 \text{ eV}$</p> <p>Плотность электронов: $n_e = 10^8 - 10^{16} \text{ cm}^{-3}$</p>

Табл. 2 Кинетическая схема из работы [46].

Компоненты	Реакции	Рассматриваемые в работе условия
<p>Возбужденные состояния D^* Ионы D_2^+, D^+ Атомы D</p>	<p>СТОЛКНОВЕНИЯ С УЧАСТИЕМ ЭЛЕКТРОНОВ</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. $D_2 + e \rightarrow D_2 + e$ 2. $D_2 + e \rightarrow D_2^+ + e$ 3. $D_2 + e \rightarrow D^+ + D + 2e$ <p>СТОЛКНОВЕНИЯ АТОМОВ И ИОНОВ</p> <ol style="list-style-type: none"> 4. $D^+ + D_2 \rightarrow D^* + D_2$ 5. $D^+ + D_2 \rightarrow D + D_2^+$ 6. $D^+ + D_2 \rightarrow D^+ + D_2^+ + e$ <p>СТОЛКНОВЕНИЯ МОЛЕКУЛ И ИОНОВ</p> <ol style="list-style-type: none"> 7. $D_2^+ + D_2 \rightarrow D_2^+ + D_2$ 8. $D_2^+ + D_2 \rightarrow D_2 + D_2^+$ 9. $D_2^+ + D_2 \rightarrow D_2^+ + D_2^+ + e$ 10. $D_2^+ + D_2 \rightarrow D^+ + D + D_2$ <p>СТОЛКНОВЕНИЯ С «БЫСТРЫМИ» АТОМАМИ</p> <ol style="list-style-type: none"> 11. $D + D_2 \rightarrow D + D_2$ 12. $D + D_2 \rightarrow D^+ + D_2 + e$ 13. $D + D_2 \rightarrow D + D_2^+ + e$ <p>СТОЛКНОВЕНИЯ С «БЫСТРЫМИ» МОЛЕКУЛАМИ</p> <ol style="list-style-type: none"> 14. $D_2 + D_2 \rightarrow D_2 + D_2$ 15. $D_2 + D_2 \rightarrow D_2^+ + D_2 + e$ 	<p>Давление: $p = 2-10 \text{ мТорр}$</p> <p>Падение напряжения: $V \approx 100 \text{ В}$</p> <p>Плотность электронов: $n_e \approx 10^9 \text{ см}^{-3}$</p>

Табл. 3 Кинетическая схема из работы [47].

Компоненты	Реакции	Рассматриваемые в работе условия
<p>Синглетные состояния $B^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$, E, $F^1\Sigma_g^+$, $B'^1\Sigma_u^+$, $D^1\Pi_u$, $B''^1\Sigma_u^+$, $D'^1\Pi_u$</p> <p>Триплетные состояния $b^3\Sigma_u^+$, $c^3\Pi_u$, $a^3\Sigma_g^+$</p> <p>Vib. Ex. States $v=1$</p> <p>Ионы H_2^+, H^+</p> <p>Атомы H, $H(1s)$, $H(n=2)$, $H(n=3)$, $H(n=4)$, $H(2p)$</p>	<p>НЕУПРУГИЕ СТОЛКНОВЕНИЯ</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. $H_2(X) + e \rightarrow H_2^+ + e + e$ 2. $H_2(v=0) + e \rightarrow H_2(v=1) + e$ 3. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(b^3\Sigma_u^+) + e$ 4. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(c^3\Pi_u) + e$ 5. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(a^3\Sigma_g^+) + e$ 6. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+) + e$ 7. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(C^1\Pi_u) + e$ 8. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(E - F^1\Sigma_u^+) + e$ 9. $H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow H(n=2) + H + e$ 10. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(B'^1\Sigma_u^+) + e$ 11. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(D^1\Pi_u) + e$ 12. $n_e = 10^{10} - 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ $H_2(X) + e \rightarrow H_2(B''^1\Sigma_u^+) + e$ 13. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(D'^1\Pi_u) + e$ 14. $H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow H(n=3) + H + e$ 15. $H + e \rightarrow H^+ + e + e$ 16. $H(1s) + e \rightarrow H(2p) + e$ 17. $H(1s) + e \rightarrow H(n=3) + e$ 18. $H(1s) + e \rightarrow H(n=4) + e$ <p>УПРУГИЕ СТОЛКНОВЕНИЯ</p> <ol style="list-style-type: none"> 19. $e + H_2(X) \rightarrow e + H_2(X)$ 20. $e + H(1s) \rightarrow e + H(1s)$ <p>РЕКОМБИНАЦИЯ</p> <ol style="list-style-type: none"> 21. H_2^+ dissociative recombination 22. H_3^+ dissociative recombination 	<p>Давление: $p = 0.4 - 40 \text{ mTorr}$</p> <p>Падение напряжения: $V = 30 - 100 \text{ V}$</p> <p>Плотность электронов:</p>

Табл. 4 Кинетическая схема из работы [42].

Компоненты	Реакции	Рассматриваемые в работе условия
<p>Синглетные состояния: $B^1\Sigma_u^+$, $D^1\Pi_u$ Атомы: D, H Колебат. и вращат. состояния: $H_2(X^1\Sigma_g^+, v, j)$ $v = 14, j = 16$</p>	<p>НЕПРЯМОЕ КОЛЕБАТЕЛЬНОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ H_2 :</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+, v') + e \rightarrow H_2(X^1\Sigma_g^+, v_f) + e + hv$ 2. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+, v') + e \rightarrow H_2(X^1\Sigma_g^+, v_f) + e + hv$ <p>СТУПЕНЧАТАЯ ДИССОЦИАЦИЯ H_2 :</p> <ol style="list-style-type: none"> 3. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+, v') + e \rightarrow H+H + e + hv$ 4. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+, v') + e \rightarrow H+H + e + hv$ <p>НЕПРЯМОЕ КОЛЕБАТЕЛЬНОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ D_2 :</p> <ol style="list-style-type: none"> 5. $D_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow D_2(B^1\Sigma_u^+, v') + e \rightarrow D_2(X^1\Sigma_g^+, v_f) + e + hv$ 6. $D_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow D_2(B^1\Sigma_u^+, v') + e \rightarrow D_2(X^1\Sigma_g^+, v_f) + e + hv$ <p>СТУПЕНЧАТАЯ ДИССОЦИАЦИЯ D_2 :</p> <ol style="list-style-type: none"> 7. $D_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow D_2(B^1\Sigma_u^+, v') + e \rightarrow D+D + e + hv$ 8. $D_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow D_2(B^1\Sigma_u^+, v') + e \rightarrow D+D + e + hv$ <p>ДИССОЦИАЦИИ ЧЕРЕЗ СТОЛКНОВЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ И АТОМА:</p> <ol style="list-style-type: none"> 9. $D_2(X^1\Sigma_g^+, v, j) + D = D + D + D$ 10. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v, j) + H = H + H + H$ 	

Табл. 5 Кинетическая схема из работы [50].

Компоненты	Реакции	Условия
<p>Синглетные состояния $B^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$, E, $F^1\Sigma_g^+$, $B'^1\Sigma_u^+$, $D^1\Pi_u$, $B''^1\Sigma_u^+$, $D^1\Pi_u$</p> <p>Триплетные состояния $b^3\Sigma_u^+$, $c^3\Pi_u$, $a^3\Sigma_g^+$, $d^3\Sigma_g^+$, $e^3\Sigma_g^+$</p> <p>Колебательные состояния: $v=14$ (and rotational)</p> <p>Ионы H_2^+, H_3^+, H_5^+, H^+, H^-</p> <p>Атомы H</p>	<p>неупругие столкновения</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. $e + H_2(X, v, j) \rightarrow e + H_2(X, v, j + 2)$ 2. $e + H_2(X, v) \rightarrow e + H_2(X, v')$, $v' - v \leq 3$ 3. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(b^3\Sigma_u^+) + e$ 4. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(c^3\Pi_u) + e$ 5. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(a^3\Sigma_g^+) + e$ 6. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(d^3\Sigma_g^+) + e$ 7. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(e^3\Sigma_g^+) + e$ 8. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+) + e$ 9. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(C^1\Pi_u) + e$ 10. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(E, F^1\Sigma_u^+) + e$ 11. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(B'^1\Sigma_u^+) + e$ 12. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(D^1\Pi_u) + e$ 13. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(B''^1\Sigma_u^+) + e$ 14. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(D^1\Pi_u) + e$ 15. $H(n=1) + e \rightarrow H(n'=2) + e$ 16. $H(n) + e \rightarrow H(n' > 2) + e$ 17. $H^- + e \rightarrow H + e + e$ <p>ионизация</p> <ol style="list-style-type: none"> 18. $H + e \rightarrow H^- + H$ 19. $H(n=1) + e \rightarrow H^+ + e + e$ 20. $H(n > 1) + e \rightarrow H^+ + e + e$ 21. $H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow H_2^+(X^2\Sigma_g^+, X^2\Sigma_u^+) + e$ 22. $H_2^+ + e \rightarrow H^+ + H + e$ 23. $H_3^+ + e \rightarrow H^+ + H + H + e$ 24. $H_5^+ + e \rightarrow H_3^+ + H_2 + e$ <p>диссоциация</p> <ol style="list-style-type: none"> 25. $H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow 2H(n=1) + e$ 26. $H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow H(n=1) + H(n=2) + e$ <p>колебательная кинетика:</p> <ol style="list-style-type: none"> 27. $H_2(X, v) + H_2(X, w+1) \rightarrow H_2(X, v+1) + H_2(X, w)$ <p>столкновения с участием атомов</p> <ol style="list-style-type: none"> 28. $H(n=2) + H_2(X^1\Sigma_g^+, v) \rightarrow H(n=1) + H_2(b^3\Sigma_u^+) \rightarrow 3H(n=1)$ 29. $H + H + H \leftrightarrow H_2(X, v=14) + H$ 30. $H(n) \rightarrow H(n') + hv$ 	<p>Давление: $p=1$ Торр</p> <p>Разрядный ток: $I=300$ А</p> <p>Плотность электронов: $n_e \approx 10^{15}$ cm^{-3}</p>

Табл. 6 Кинетическая схема из работ [51], [52].

Компоненты	Реакции
Синглетные состояния $B^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$, E , $F^1\Sigma_g^+$, $B'^1\Sigma_u^+$, $D^1\Pi_u$, $B''^1\Sigma_u^+$, $D'^1\Pi_u$ Триплетные состояния $b^3\Sigma_u^+$ Колебат. возб. состояния $\nu=20$ Ионы H_2^+ , H^+ , H^- Атомы H	ДИССОЦИАТИВНОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ:
	<ol style="list-style-type: none"> 1. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow H(1s) + H(2l) + e$ 2. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(C^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow H(1s) + H(2l) + e$ 3. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(I^1\Pi_g) + e \rightarrow H(1s) + H(2l) + e$ 4. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(B'^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow 2H + e$ 5. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(D^1\Pi_u) + e \rightarrow 2H + e$ 6. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(B''^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow 2H + e$ 7. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(D'^1\Pi_u) + e \rightarrow 2H + e$ 8. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(b^3\Sigma_u^+) + e \rightarrow H(1s) + H(1s) + e$ $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2^*(B^1\Sigma_u^+, C^1\Pi_u) + e \rightarrow$ 9. $\rightarrow H_2(X^1\Sigma_g^+) + e + hv \rightarrow$ $\rightarrow H(1s) + H(1s) + e + hv$
	ИОНИЗАЦИЯ:
	<ol style="list-style-type: none"> 10. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(X^2\Sigma_g^+) + 2e \rightarrow H(1s) + H^+ + 2e$ 11. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(^2\Sigma_u^+) + 2e \rightarrow H(1s) + H^+ + 2e$ 12. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2^+(X^2\Sigma_g^+) + 2e$
	ВОЗБУЖДЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ:
	<ol style="list-style-type: none"> 13. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+) + e$ 14. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(C^1\Sigma_u^+) + e$ 15. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(I^1\Pi_g) + e$ 16. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(B'^1\Sigma_u^+) + e$ 17. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(D^1\Pi_u) + e$ 18. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(B''^1\Sigma_u^+) + e$ 19. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(D'^1\Pi_u) + e$
	СТУПЕНЧАТОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ
	<ol style="list-style-type: none"> 20. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2^*(B^1\Sigma_u^+, C^1\Pi_u) + e \rightarrow$ $\rightarrow H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_f) + e + hv$
	ДИССОЦИАТИВНОЕ ПРИСОЕДИНЕНИЕ ЭЛЕКТРОНА:
	<ol style="list-style-type: none"> 21. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2^-(^2\Sigma_u^+) + e \rightarrow H(1s) + H^-(1s^2)$

Табл. 7 Кинетическая схема из работы [53].

Компоненты	Реакции	Рассматриваемые в работе условия
Синглетные состояния $B^1\Sigma_u^+, C^1\Pi_u$ Триплетные состояния $b^3\Sigma_u^+, c^3\Pi_u, a^3\Sigma_g^+$ Колебат. возб. сост. $\nu=15$ Ионы H_2^+, H^+, H_2^-, H^- Атомы H	КОЛЕБАТЕЛЬНОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ 1. $H_2(X, \nu) + e \rightarrow H_2^- \rightarrow H_2(X, w) + e, \nu < w$ 2. $H_2(X, \nu=0) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+, C^1\Pi_u) + e \rightarrow H_2(X, w) + e + h\nu$ 3. $H + H_2(X, \nu=0) \rightleftharpoons H + H_2(X, \nu=1)$ ДИССОЦИАЦИЯ 4. $H_2(X, \nu) + e \rightarrow H_2(b^3\Sigma_u^+, c^3\Pi_u, a^3\Sigma_g^+) + e \rightarrow 2H + e$ 5. $H_2 + e \rightarrow e + H + H^*$ 6. $H_2^+ + H_2 \rightarrow H_3^+ + H$ 7. $H_2(X, \nu) + e \rightarrow H + H^-$ 8. $H^- + H_3^+ \rightarrow \text{neutrals}$ 9. $H^- + H \rightarrow H_2 + e$ ИОНИЗАЦИЯ 10. $H_2(X, \nu) + e \rightarrow H_2^+ + e + e$ ДИССОЦИАТИВНАЯ РЕКОМБИНАЦИЯ 11. $H_2(X, \nu) + e \rightarrow H_2^- \rightarrow H + H^-$	Давление: $p \sim 40 \text{ mTorr}$ Падение напряжения: $V \sim 90 \text{ V}$ Разрядный ток: $I=1, 10 \text{ A}$

Табл. 8 Кинетическая схема из работы [58].

Реакции	Рассматриваемые в работе условия
НЕУПРУГИЕ ПРОЦЕССЫ 1. $H_2(a^3\Sigma_g^+) + e \rightarrow H_2(d^3\Sigma_u^+) + e$ 2. $H_2(c^3\Pi_u) + e \rightarrow H_2(g^3\Sigma_g^+) + e$ 3. $H_2(c^3\Pi_u) + e \rightarrow H_2(h^3\Sigma_g^+) + e$	Давление: $p=10 \text{ mTorr}$ Амплитуда напряжения: $V=300 \text{ V}$

Табл. 9 Кинетическая схема из работы [61].

Реакции	Рассматриваемые в работе условия
ДИССОЦИАЦИЯ 1. $H_2(X) + e \rightarrow H(1s) + H(1s)$ 2. $H_2(X) + e \rightarrow H(1s) + H(2s)$ 3. $H_2(X) + e \rightarrow H(1s) + H(3s)$ 4. $H_2(X) + e \rightarrow H(2s) + H(2p)$	Давление: $p \approx 2 \text{ mTorr}$ Разрядный ток: $I \approx 10 \text{ A}$

Табл. 10 Кинетическая схема из работы [63].

Компоненты	Реакции	Рассматриваемые в работе условия
Синглетные состояния $B^1\Sigma_u^+$ Колеб. возб. сост. $\nu=14$ Ионы H_2^+, H^+ Атомы $H(1s), H^*(2p)$	НЕУПРУГИЕ ПРОЦЕССЫ 1. $H_2(\nu)+e \rightarrow H_2(\nu \pm 1)+e$ 2. $H_2(X,\nu)+e \rightarrow H_2(X,\nu'')+e$ 3. $H_2(X,\nu)+e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+)+e$ 4. $H(1s)+e \rightarrow H^*(2p)+e$ 5. $H_2(X)+e \rightarrow H_2^+(\nu)+e+e$ 6. $H(1s)+e \rightarrow H^+ + e + e$ 7. $H_2(X,\nu)+e \rightarrow H(1s)+H^-$ 8. $H_3^+ + e \rightarrow 3H$ or $H_2(\nu > 5)+H^*(n=2)$ 9. $H_2 + e \rightarrow H_2 + e$ 10. $H + e \rightarrow H + e$	Давление: $p \approx 2$ мТорр Падение напряжения: $V \sim 60$ В Разрядный ток: $I=166.6$ А

Табл. 11 Кинетическая схема из работы [66].

Компоненты	Реакции	Рассматриваемые в работе условия
Ионы H_2^+, H_3^+, H^+, H^- Атомы H, H^*	С УЧАСТИЕМ ЭЛЕКТРОНОВ 1. $H+e \rightarrow H^+ + e + e$ 2. $H_2 + e \rightarrow H+H^+ + e + e$ 3. $H_2^+ + e \rightarrow H^+ + H + e$ 4. $H_2^+ + e \rightarrow H^+ + H^+ + e + e$ 5. $H_2 + e \rightarrow H_2^+ + e + e$ 6. $H_3^+ + e \rightarrow H_2^+ + H + e$ 7. $H_2^+ + e \rightarrow H^* + H$ 8. $H_3^+ + e \rightarrow 3H$ 9. $H_3^+ + e \rightarrow H_2 + H$ 10. $H_2 + e \rightarrow 2H + e$ СТОЛКНОВЕНИЯ ТЯЖЕЛЫХ ЧАСТИЦ 11. $H_2^+ + H \rightarrow H_2 + H^+$ 12. $H_2 + H^+ \rightarrow H_2^+ + H$ 13. $H_2^+ + H_2 \rightarrow H_3^+ + H$	Давление: $p \approx 0.006-0.15$ Торр Падение напряжения: $V \sim 400-460$ В Разрядный ток: $I=150$ мА

Табл. 12 Кинетическая схема из работы [67], [68].

Компоненты	Реакции	Рассматриваемые в работе условия
<p>Синглетные состояния $B^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$, $B'^1\Sigma_u^+$, $D^1\Pi_u^+$, $BU\Sigma$</p> <p>Триплетные состояния $a^3\Sigma_u^+$, $e^3\Sigma_u^+$, $c^3\Pi_u$, $b^3\Sigma_u^+$</p> <p>Колеб. возб. сост. $\nu=15$</p> <p>Ионы H_2^+, H^+</p> <p>Атомы H</p>	<p>С УЧАСТИЕМ ЭЛЕКТРОНОВ</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. $H + e \rightarrow H + e$ 2. $H + e \rightarrow H^+ + e + e$ 3. $H_2(v) + e \rightarrow H_2(w) + e$ (eV) 4. $H_2(v) + e \rightarrow H_2(w) + e + hv$ (EV) 5. $H_2(v) + e \rightarrow H_2^* + e$ (eE) via: $B^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$, $D^1\Pi_u$, $B'^1\Sigma_u^+$, $D^1\Pi_u^+$, $BU\Sigma$, $a^3\Sigma_u^+$ 6. $H_2(v) + e \rightarrow H_2^+ + e + e$ (eI) 7. $H_2 + e \rightarrow H + H + e$ (eD) via: $B^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$, $D^1\Pi_u$, $B'^1\Sigma_u^+$, $D^1\Pi_u^+$, $BU\Sigma$, $e^3\Sigma_u^+$, $c^3\Pi_u$, $b^3\Sigma_u^+$ 8. $H_2 + e \rightarrow H + H^+ + e + e$ (eDI) via: $X^2\Sigma_g^+$, $^2\Sigma_u$ 9. $H_2(v) + e \rightarrow H + H^+$ (DA) <p>СТОЛКНОВЕНИЯ ТЯЖЕЛЫХ ЧАСТИЦ</p> <ol style="list-style-type: none"> 10. $H + H^+ \rightarrow H^+ + H$ 11. $H_2(v) + H^+ \rightarrow H_2(w) + H^+$ (pV) 12. $H_2(v) + H^+ \rightarrow H_2^+ + H$ (p-CX) 13. $H_2(v) + H^+ \rightarrow H^+ + H + H$ (pV-diss) 14. $H_2(v) + H \rightarrow H_2(w) + H$ (Vt) 15. $H_2(v) + H \rightarrow H + H + H$ (Vt-diss) 16. $H_2(v) + H_2(w) \rightarrow H_2(v \pm 1) + H_2(w)$ (VT) 17. $H_2(14) + H_2(w) \rightarrow H + H + H_2(w)$ (VT-diss) <p>РЕАКЦИИ НА ПОВЕРХНОСТИ</p> <ol style="list-style-type: none"> 18. $H_2^+ + wall \rightarrow H_2(w)$ (sV₂) 19. $H + Cu \rightarrow H_{ad} + Cu$ $H + H_{ad} + Cu \rightarrow H_2(w) + Cu$ (AV) 	<p>Давление: $p \approx 2$ мТорр</p> <p>Подводимая мощность: $w \sim 170$ kW</p> <p>Ток: $I = 150$ mA</p> <p>Частота: 1 MHz</p>

Глава 2. Описание методов решения кинетического уравнения Больцмана для электронов

2.1. Формулировка кинетического уравнения Больцмана для электронов. Лоренцево приближение.

Система интегрируемых уравнений

Рассматривается задача определения неравновесной функции распределения электронов по энергиям в плазме молекулярного азота в однородном электрическом поле в условиях, характерных для плазмы тлеющего разряда. Для решения данной задачи рассматривается кинетическое уравнение Больцмана для электронов в ионизованном газе:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \nabla f - \frac{e}{m} \mathbf{E} \cdot \nabla_v f = C[f], \quad (1)$$

где f - функция распределения электронов в шестимерном фазовом пространстве координат и скоростей, v - скорость электрона, e и m - заряд и масса электрона, E - напряженность электрического поля, ∇_v - градиент в пространстве скоростей, C - интеграл столкновений.

В случае однородного в пространстве электрического поля ФРЭЭ будет изотропной по всем направлениям движения электронов, за исключением направления приложенного поля. Тогда, используя сферические координаты в пространстве скоростей, уравнение (1) можно переписать в виде:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cos \theta \frac{\partial f}{\partial z} - \frac{e}{m} E \left(\cos \theta \frac{\partial f}{\partial v} + \frac{\sin^2 \theta}{v} \frac{\partial f}{\partial \cos \theta} \right) = C[f], \quad (2)$$

где v - абсолютная величина скорости электрона, θ - угол между направлением движения электрона и направлением приложенного поля, z - координата вдоль оси с направлением, совпадающим с направлением поля. Таким образом, в наиболее общем случае ФРЭЭ является функцией четырех переменных: v , θ , z , t .

В общем случае для того, чтобы решить уравнение (2), функцию распределения необходимо разложить по полиномам Лежандра (зависящих от $\cos\theta$). После подстановки разложения в уравнение (2), мы получим систему дифференциальных уравнений относительно коэффициентов разложения. В большинстве случаев такое разложение быстро сходится и достаточно ограничиться первыми двумя членами разложения. В этом случае функция распределения имеет вид:

$$f(v, \cos\theta, z, t) = f_0(v, z, t) + f_1(v, z, t)\cos\theta, \quad (3)$$

где f_0 - изотропная часть распределения, а f_1 - анизотропная поправка к f_0 .

Для того, чтобы получить уравнения относительно функции f_0 и f_1 , необходимо умножить (2) на полиномы Лежандра (1 и $\cos\theta$), и проинтегрировать получившиеся уравнения по углам:

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} + \frac{\gamma}{3}\varepsilon^{1/2}\frac{\partial f_1}{\partial z} - \frac{\gamma}{3}\varepsilon^{-1/2}\frac{\partial}{\partial \varepsilon}(\varepsilon E f_1) = \tilde{C}_0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \gamma\varepsilon^{1/2}\frac{\partial f_0}{\partial z} - E\gamma\varepsilon^{1/2}\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = -N\sigma_m\gamma\varepsilon^{1/2}f_1, \quad (5)$$

где, $\gamma = \left(\frac{2e}{m}\right)^{1/2}$, $\varepsilon = \left(\frac{v}{\gamma}\right)^2$ - энергия в эВ, σ_m - сечение рассеяния упругих соударений. Правая часть уравнения (4) содержит член C_0 , отвечающий за изменение функции распределения за счет столкновений электронов с молекулами или атомами.

В случае, если частота неупругих соударений намного больше частоты упругих, то решаемая задача является квазистационарной и функция распределения не зависит от времени. В данной работе также будем считать, что ФРЭЭ пространственно однородная, поэтому производные по пространственной координате равны нулю. Нормировка функции распределения, не зависящей от координат и времени определяется следующим условием:

$$\int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} f_0(\varepsilon) d\varepsilon = 1, \quad (6)$$

Интегралы столкновений

Интегралы столкновения в правой части уравнений (1), (2), (4) определяют влияние упругих, неупругих и межэлектронных столкновений на функцию распределения электронов по энергиям:

$$\tilde{C}_0 = \varepsilon^{-1/2} N \left(\sum_k C_{0,k} + C_{0,\text{elastic}} + C_{0,\text{ee}} \right) \quad (7)$$

где N - плотность молекул газа, $C_{0,k}$, $C_{0,\text{elastic}}$, $C_{0,\text{ee}}$ - интегралы столкновения для процессов неупругого, упругого и межэлектронного столкновения, k – порядковый номер неупругого процесса.

Вклад упругих столкновений в функцию распределения подробно описан в работе [73] и определяется выражением:

$$C_{0,\text{elastic}} = \gamma \frac{2m}{M} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[\varepsilon^2 \sigma_k \left(f_0 + \frac{k_B T}{e} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \right], \quad (8)$$

где M и T - масса молекул и температура газа. Здесь первый член отвечает за энергию, передаваемую электронами молекулам (атомам) при упругом столкновении, второе слагаемое описывает передачу импульса от тяжелых частиц электронам в предположении, что распределение молекул по энергиям – максвелловское. Данный член отвечает за формирование функции распределения при очень малых значениях E/N .

Вклад неупругих соударений электронов с молекулами, при которых происходит возбуждение колебательных или электронных уровней, а также соударения второго рода описываются следующей формулой [13]:

$$C_{0,k} = -\gamma \left[\varepsilon \sigma_k(\varepsilon) f_0(\varepsilon) - (\varepsilon + u_k) \sigma_k(\varepsilon + u_k) f_0(\varepsilon + u_k) \right] \quad (9)$$

где σ_k - сечение неупругого процесса, u_k - пороговая энергия процесса неупругого соударения ($u_k < 0$ для соударений второго рода). Здесь первое слагаемое описывает уход электрона из области спектра, в которой он находился до соударения с молекулой, второе слагаемое описывает его появление в спектре после соударения, когда энергия электрона уменьшилась на величину u_k (и наоборот в случае соударений второго рода).

Интеграл столкновений для процессов ионизации зависит от того, как распределяется энергия между двумя электронами после ионизации. В случае, если энергия налетающего электрона распределяется поровну между двумя электронами, интеграл столкновений имеет вид [25]:

$$C_{0,\text{ionization}} = -\gamma \left[\varepsilon \sigma_k(\varepsilon) f_0(\varepsilon) - 2(2\varepsilon + u_k) \sigma_k(2\varepsilon + u_k) f_0(2\varepsilon + u_k) \right], \quad (10)$$

Если считать вся энергия после столкновения остается у исходного электрона, а «родившийся» после ионизации электрон имеет нулевую энергию, то интеграл столкновения будет иметь следующий вид:

$$C_{0,\text{ionization}} = -\gamma \left[\varepsilon \sigma_k(\varepsilon) f_0(\varepsilon) - (\varepsilon + u_k) \sigma_k(\varepsilon + u_k) f_0(\varepsilon + u_k) \right] + \delta(\varepsilon) \gamma \int_0^{\infty} u \sigma_k(u) f_0(u) du \quad (11)$$

где $\delta(\varepsilon)$ - дельта-функция.

Случай поглощения электрона молекулой описывается следующей формулой:

$$C_{0,\text{attachment}} = -\gamma \left[\varepsilon \sigma_k(\varepsilon) f_0(\varepsilon) \right] \quad (12)$$

Учет межэлектронного взаимодействия при решении уравнения Больцмана описан в работе [25]. В этом случае, если функция распределения электронов по энергиям является изотропной функцией, интеграл столкновений равен:

$$C_{0,ee} = a \frac{n}{N} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left[3A_1 f_0 + 2(A_2 + \varepsilon^{3/2} A_3) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right], \quad (13)$$

где $A_1 = \int_0^{\varepsilon} u^{1/2} f_0(u) du,$

$$A_2 = \int_0^{\varepsilon} u^{3/2} f_0(u) du,$$

$$A_3 = \int_0^{\infty} f_0(u) du,$$

$$a = \frac{e^2 \gamma}{24 \pi \varepsilon_0^2} \ln(\Lambda), \quad \Lambda = \frac{12 \pi (\varepsilon_0 k_B T_e)^{3/2}}{e^3 n^{1/2}}$$

Здесь первое слагаемое описывает столкновения с более медленными электронами, а второе - диффузию в область более высоких энергий. Для того, чтобы функция распределения стала максвелловской, необходимо, чтобы эти два члена сократились.

2.2. Расчет коэффициентов переноса и констант скорости в плазме на основе решения кинетического уравнения

Уравнение непрерывности для электронов

Уравнение непрерывности для электронов может быть получены из системы (4) -(5) если умножить уравнение (4) на $\varepsilon^{1/2}$ и проинтегрировать во всем диапазоне энергий:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial \Gamma}{\partial z} = S, \quad (14)$$

где S описывает источник электронов, а поток электронов Γ определяется следующей формулой:

$$\Gamma = n w = n \frac{\gamma}{3} \int_0^{\infty} \varepsilon f_1 d\varepsilon \quad (15)$$

Подставив в (15) также выражение (5) получим диффузионную и дрейфовую составляющие потока электронов:

$$\Gamma = -\mu E n - \frac{\partial(Dn)}{\partial z}, \quad (16)$$

где μ - подвижность, а D - коэффициент диффузии электронов определяются через функцию распределения следующими выражениями:

$$\mu N = -\frac{\gamma}{3} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon}{\sigma_m} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\varepsilon, \quad (17)$$

$$DN = \frac{\gamma}{3} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon}{\sigma_m} f_0 d\varepsilon, \quad (18)$$

Уравнение сохранения энергии для электронов

Уравнение сохранения энергии для электронов получается из системы уравнений (4)-(5) если умножить уравнение (4) на $\varepsilon^{3/2}$ и проинтегрировать во всем диапазоне энергий:

$$\frac{\partial n_\varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \Gamma_\varepsilon}{\partial z} + E \Gamma = S_\varepsilon, \quad (19)$$

$$n_\varepsilon = n \int_0^{\infty} \varepsilon^{3/2} f_0 d\varepsilon = n \bar{\varepsilon}, \quad (20)$$

$$\Gamma_\varepsilon = n \frac{\gamma}{3} \int_0^{\infty} \varepsilon^2 f_1 d\varepsilon, \quad (21)$$

где плотность энергии n_ε и Γ_ε - плотность и поток энергии электронов, $\bar{\varepsilon}$ - средняя энергия электронов, S_ε - источниковый член, определяющий изменение спектра электронов за счет столкновений с молекулами.

С учетом уравнения (5), выражение (21) можно переписать в виде:

$$\Gamma_{\varepsilon} = -\mu_{\varepsilon} E n_{\varepsilon} - \frac{\partial(D_{\varepsilon} n_{\varepsilon})}{\partial z}, \quad (22)$$

$$\mu_{\varepsilon} N = -\frac{\gamma}{3\bar{\varepsilon}} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^2}{\sigma_m} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\varepsilon, \quad (23)$$

$$D_{\varepsilon} N = \frac{\gamma}{3\bar{\varepsilon}} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^2}{\sigma_m} f_0 d\varepsilon, \quad (24)$$

где μ_{ε} и D_{ε} - энергетические подвижность и коэффициент диффузии. Данная формулировка уравнения сохранения энергии была предложена в работе [25]. Первое слагаемое в (22) описывает изменение потока энергии за счет набора энергии электронами в поле, второе – процесс термодиффузии.

Определение констант скорости и коэффициентов Таунсенда для процессов возбуждения и ионизации

На основе рассчитанной ФРЭЭ и используемых сечений, константы скорости процессов возбуждения и ионизации рассчитываются по следующей формуле [25]:

$$C_k = N n k_k = \gamma \int_0^{\infty} \varepsilon \sigma_k f_0 d\varepsilon, \quad (25)$$

где n и N - концентрации электронов и молекул газа, k_k - константа скорости (в расчете на одну частицу).

Зная константы скорости, коэффициенты Таунсенда рассчитываются на основе следующих соотношений:

$$C_k = \alpha_k |\Gamma|, \quad (26)$$

$$\frac{\alpha_k}{N} = \frac{k_k}{\mu E}, \quad (27)$$

где α_k - коэффициенты Таунсенда, Γ - поток электронов.

2.3. Описание численных алгоритмов решения кинетического уравнения Больцмана для электронов

1. Метод Бойера-Шермана.

В данной работе кинетическое уравнение Больцмана решается в квазистационарной постановке. Рассматривается система уравнений (4)-(5) с интегралом столкновений для процессов упругого рассеяния электронов (8) [74], а также возбуждения колебательных и электронных уровней (9):

$$\begin{aligned} & \frac{E^2}{3} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\frac{\varepsilon}{N \sigma_m} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) + \frac{2m}{M} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} (\varepsilon^2 N \sigma_m f_0) + \frac{2mkT}{Me} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\varepsilon^2 N \sigma_m \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) + \\ & + \sum_j (\varepsilon + \varepsilon_j) f_0(\varepsilon + \varepsilon_j) N \sigma_j(\varepsilon + \varepsilon_j) - \sum_j \varepsilon f_0(\varepsilon) N \sigma_j(\varepsilon) + \\ & + \sum_j (\varepsilon - \varepsilon_j) f_0(\varepsilon - \varepsilon_j) N \sigma_j(\varepsilon - \varepsilon_j) - \sum_j \varepsilon f_0(\varepsilon) N \sigma_j(\varepsilon) = 0, \end{aligned} \quad (28)$$

Для удобства расчетов перейдем к безразмерным переменным:

$$z = \frac{e\varepsilon}{kT}, \quad \theta = \frac{\sigma_m}{\sigma_0}, \quad \alpha = \frac{M}{6m} \left(\frac{eE}{N\sigma_0 kT} \right)^2, \quad \eta_{\pm j} = \frac{M\sigma_{\pm j}}{2m\sigma_0}, \quad (29)$$

Для расчета сечений процессов второго рода используется соотношение Клейна-Росселанда, выражающее принцип детального равновесия для процессов соударения первого и второго рода:

$$(u - u_{i \rightarrow j}^{nop}) \sigma_{j \rightarrow i} (u - u_{i \rightarrow j}) = \exp(-u_{i \rightarrow j}^{nop}) u \sigma_{i \rightarrow j} (u), \quad u \geq u_{i \rightarrow j} \quad (30)$$

Тогда уравнение (28) с учетом Больцмановского распределения молекул по энергиям и соотношения (30) примет вид:

$$\begin{aligned}
& \alpha \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{z}{\theta} \frac{\partial f_0}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} (z^2 \theta f_0) + \frac{\partial}{\partial z} \left(z^2 \theta \frac{\partial f_0}{\partial z} \right) + \\
& + \sum_j (z + z_j) f_0(z + z_j) \eta_j(z + z_j) - \sum_j z f_0(z) \eta_j(z) + \\
& + \sum_j z f_0(z - z_j) \eta_j(z) \exp(-z_j) - \sum_j (z + z_j) f_0(z) \eta_j(z + z_j) \exp(-z_j) = 0,
\end{aligned} \tag{31}$$

После интегрирование уравнения (31) по z получим следующее дифференциально-разностное уравнение:

$$\left(\frac{\alpha}{\theta} + z\theta \right) z \frac{\partial f_0}{\partial z} + z^2 \theta f_0 + \sum_j \int_z^{z_j} z \eta_j(z) \left[f_0(z) - \exp(-z_j) f_0(z - z_j) \right] dz = 0, \tag{32}$$

где функция распределения нормирована условием:

$$\int_0^{\infty} z^{1/2} f_0(z) dz = 1, \tag{33}$$

Для дальнейшего преобразования уравнения (32) представим функцию распределения в виде [75], [76]:

$$f_0(z) = v(z) \gamma(z), \tag{34}$$

$$\text{где } \gamma(z) = \exp \left(- \int_0^z \frac{y \theta^2(y) dy}{\alpha + y \theta^2(y)} \right). \tag{35}$$

Тогда (32) преобразуется к виду:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial v(z)}{\partial z} + \frac{1}{\gamma(z) h(z)} \sum_{k=1}^n \int_z^{z+z_k} x \eta_k(x) \gamma(x) v(x) dx - \\
& - \frac{1}{\gamma(z) h(z)} \sum_{k=1}^n \exp(-z_k) \int_{z-z_k}^z (x+z_k) \eta_k(x+z_k) \gamma(x) v(x) dx = 0,
\end{aligned} \tag{36}$$

где $h(z) = \frac{z(\alpha + z\theta^2(z))}{\theta(z)}$, z_k и η_k - пороговая энергия и сечение рассеяния k -го неупругого процесса.

После интегрирования (36) от z до δ и смены порядка интегрирования получим:

$$v(z) = v(\delta) + \sum_{k=1}^n \int_z^{\delta+z_k} x \eta_k(x) \gamma(x) \left\{ \begin{array}{l} G[\min(\delta, x)] \\ -G[\max(z, x-z_k)] \end{array} \right\} v(x) dx -$$

$$- \sum_{k=1}^n \exp(-z_k) \int_{z-z_k}^{\delta} (x+z_k) \eta_k(x+z_k) \gamma(x) \left\{ \begin{array}{l} G[\min(\delta, x+z_k)] \\ -G[\max(z, x)] \end{array} \right\} v(x) dx, \quad (37)$$

где $G(x) = \int_0^x \frac{dy}{h(y)\gamma(y)}$, (38)

В случае использования однородной сетки по энергетической оси с шагом h :

$$\delta = Nh, \quad z_k = N_k h, \quad x_j = jh, \quad v(x_j) = v_j. \quad (39)$$

Тогда заменив интегрирование суммированием в (37) получим систему линейных уравнений относительно v_j :

$$v_i = \sum_{j=1}^{N-1} b_{ij} v_j + a_i, \quad \text{где} \quad (40)$$

$$b_{ij} = h E_{ij} \sum_{k=1}^n x_j \eta_k(x_j) \gamma(x_j) \left\{ \begin{array}{l} G(x_j) \\ -G[\max(x_i, x_j - z_k)] \end{array} \right\} -$$

$$- h \sum_{k=1}^n (x_j + z_k) E_{ij}^k \eta_k(x_j + z_k) \gamma(x_j) \exp(-z_k) \left\{ \begin{array}{l} G[\min(\delta, x_j + z_k)] \\ -G[\max(x_i, x_j)] \end{array} \right\} \quad (41)$$

$$E_{ij} = \begin{cases} 0, & j \leq i, \\ 1, & j > i; \end{cases} \quad E_{ij}^k = \begin{cases} 0, & j \leq i - N_k, \\ 1, & j > i - N_k; \end{cases}$$

$$a_i = 1 + h \sum_{k=1}^n \sum_{j=N}^{N+N_k} x_j \eta_k(x_j) \gamma(x_j) \left\{ G(\delta) - G \left[\max(x_i, x_j - z_k) \right] \right\}, \quad (42)$$

Таким образом, процесс решения уравнения (28) включает следующие шаги:

- 1) Выбор шага расчетной сетки N .
- 2) Интерполяция сечений рассеяния $\theta(z_i)$ и $\eta_k(z_i)$ и их аппроксимация на узлы расчетной сетки.
- 3) Расчет коэффициентов $\gamma(z_i)$ (35) и $G(z_i)$ (38) для $1 \leq i \leq N + N_k(\max)$;
- 4) Расчет коэффициентов системы линейных уравнений a_i (42) и b_{ij} (41).
- 5) Решение системы линейных уравнений относительно v_i
- 6) Расчет ФРЭЭ f_i и транспортных коэффициентов (17)-(18), (20), (23)-(24), (25), (27).

2. Применение схемы Шарфеттера-Гумеля.

Систему уравнений (4)-(5) можно также записать в форме уравнения непрерывности в пространстве энергий:

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\tilde{W} f_0 - \tilde{D} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) = \tilde{S}, \quad (43)$$

$$\tilde{W} = -\frac{2m}{M} \gamma \varepsilon^2 \sigma_m,$$

$$\tilde{D} = \frac{\gamma}{3} \left(\frac{E}{N} \right)^2 \frac{\varepsilon}{\sigma_m} + \frac{\gamma k_B T}{e} \frac{2m}{M} \varepsilon^2 \sigma_m,$$

$$\tilde{S} = \sum_{k=1}^n \tilde{C}_{k,inelastic}$$

Первое слагаемое в левой части уравнения (43) представляет собой конвективный поток с отрицательной скоростью \tilde{W} . Он описывает уменьшение

энергии электронов за счет упругих столкновений с молекулами и электронами с меньшей энергией. Второе слагаемое – диффузионный поток, описывает нагрев электронов от поля и благодаря упругим столкновениям с частицами с более высокой энергией.

Проинтегрировав (43) по ячейке в пространстве энергий, получим уравнение:

$$\left[\tilde{W}f_0 - \tilde{D} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right]_{i+1/2} - \left[\tilde{W}f_0 - \tilde{D} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right]_{i-1/2} = \int_{\varepsilon_{i-1/2}}^{\varepsilon_{i+1/2}} \tilde{S} d\varepsilon, \quad (44)$$

Потоки в левой части уравнения (44) аппроксимируются с использованием схемы Шарфеттера-Гуммеля [25], [77]:

$$\left[\tilde{W}f_0 - \tilde{D} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right]_{i+1/2} = \frac{\tilde{W}_{i+1/2} f_{0,i}}{1 - \exp[-\delta_{i+1/2}]} + \frac{\tilde{W}_{i+1/2} f_{0,i+1}}{1 - \exp[\delta_{i+1/2}]}, \quad (45)$$

где $\delta_{i+1/2} = \tilde{W}_{i+1/2} (\varepsilon_{i+1/2} - \varepsilon_i) / \tilde{D}_{i+1/2}$ - число Пекле. Данный метод наиболее эффективен, когда конвективный и диффузионный члены в уравнении одного порядка (т.е. когда вклад неупругих столкновений в формирование ФРЭЭ незначительный) и является методом второго порядка, в случае, если диффузионный член много больше конвективного.

Правая часть уравнения (44) представима в виде:

$$\int_{\varepsilon_{i-1/2}}^{\varepsilon_{i+1/2}} \tilde{S} d\varepsilon = -P_i f_{0,i} + \sum_j Q_{i,j} f_{0,j}, \quad (46)$$

$$P_i = \sum_{k=1}^n \gamma \int_{\varepsilon_{i-1/2}}^{\varepsilon_{i+1/2}} \varepsilon \sigma_k \exp[(\varepsilon_i - \varepsilon) g_i] d\varepsilon,$$

$$Q_{i,j} = \sum_{k=1}^n \gamma \int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_2} \varepsilon \sigma_k \exp[(\varepsilon_j - \varepsilon) g_j] d\varepsilon,$$

где отрезок $[\varepsilon_1, \varepsilon_2]$ - пересечение ячейки ε_j и $\varepsilon_i + u_k$:

$$\varepsilon_1 = \min\left(\max\left(\varepsilon_{i-1/2} + u_k, \varepsilon_{j-1/2}\right), \varepsilon_{j+1/2}\right),$$

$$\varepsilon_2 = \min\left(\max\left(\varepsilon_{i+1/2} + u_k, \varepsilon_{j-1/2}\right), \varepsilon_{j+1/2}\right),$$

Функция распределения считается кусочно-экспоненциальной функцией внутри ячейки с показателем экспоненты:

$$g_i = \frac{1}{\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_{i-1}} \ln\left(\frac{f_{0,i+1}}{f_{0,i-1}}\right),$$

Подставив (45) и (46) в (44) получим систему линейных уравнений относительно $f_{0,i}$:

$$A_i f_{0,i+1} + B_i f_{0,i} + C_i f_{0,i-1} = \sum_{i \neq j} Q_{i,j} f_{0,j}, \text{ где} \quad (47)$$

$$A_i = \frac{\tilde{W}_{i+1/2}}{1 - \exp[\delta_{i+1/2}]},$$

$$B_i = \frac{\tilde{W}_{i+1/2}}{1 - \exp[-\delta_{i+1/2}]} - \frac{\tilde{W}_{i-1/2}}{1 - \exp[\delta_{i-1/2}]} + P_i - Q_{i,i},$$

$$C_i = -\frac{\tilde{W}_{i-1/2}}{1 - \exp[-\delta_{i-1/2}]}.$$

Система уравнений (47) решалась методом Гаусса-Зейделя.

2.4. Результаты численного моделирования ФРЭЭ в молекулярном азоте

Выбор базы данных сечений рассеяния

Правильный выбор набора сечений рассеяния электронов для расчета интеграла столкновений в правой части уравнения Больцмана необходим для получения достоверной функции распределения электронов, а также для расчета кинетических параметров плазмы. В работах [27], [28] отмечается, что наиболее чувствительны выбору сечений константы ионизации и возбуждения

электронных уровней. В литературе можно найти множество экспериментальных [78], [79] данных, а также полуклассических [80] и “ab-initio” квантовомеханических методов расчета дифференциальных сечений рассеяния электронов на молекулах азота.

Среди полуклассических методов расчета наиболее известен метод Чена [80], который позволяет удовлетворительно описать резонансное рассеяние, но не учитывает потенциальное. В работе [80] для расчета резонансного рассеяния применяется метод Брейта-Вигнера. Молекула азота рассматривается в приближении Борна-Оппенгеймера, а резонансное рассеяние происходит через образование квазистационарного отрицательного йона. Результаты работы удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными Шульца [78]. Однако расчеты функции распределения с данным набором сечений, выполненные в работе [81], плохо согласуются с экспериментальными значениями ФРЭЭ в азотной плазме. В работе [81] также предложен метод получения сечений рассеяния, использование которых в расчетах дает хорошее согласие с экспериментом.

Наилучшее совпадение для колебательного перехода $0 \rightarrow 1$ с экспериментальными данными Шульца [78] дают “ab-initio” расчеты [82]. Предложенный в этой работе метод позволяет также рассчитать сечения рассеяния для вращательных переходов в молекуле.

В данной главе для расчетов была выбрана база данных из работы [83]. Данная база данных включает сечения возбуждения для первых десяти колебательных уровней основного состояний азота, а также различных электронных состояний.

Для расчета правой части уравнения Больцмана в данной главе также используется база данных по сечениям рассеяния [83]. Численные расчеты ФРЭЭ и кинетических параметров плазмы на основе данных сечений показали хорошее согласие с экспериментальными данными [26]–[29]. В этой базе данных содержатся сечения рассеяния первых 10 колебательных уровней основного

электронного состояния молекулы азота, а также сечения рассеяния следующих электронно возбужденных уровней:

$$N_2(X^1\Sigma_g^+, v), v=0-10; N_2(A^3\Sigma_u^+, v), v=0-4; N_2(A^3\Sigma_u^+, v), v=5-9;$$

$$N_2(B^3\Pi_g^+); N_2(C^3\Pi_u^+); N_2(W^3D_u); N_2(A^3\Sigma_u^+, v), v>9; N_2(B^3\Sigma_u^-);$$

$$N_2(a^1\Sigma_u^-); N_2(a^1\Pi_g); N_2(W^1D_u); N_2(E^3\Sigma_g^+); N_2(a^1\Sigma_g^+);$$

Для расчета сечений процессов возбуждения с более высоких колебательных уровней использовалась методика, описанная в [81]:

$$\sigma_{i \rightarrow j}(\varepsilon) = \sigma_{0 \rightarrow j-i}(\varepsilon + d), \quad (48)$$

$$d = u_{0 \rightarrow j-i}^{nop} - u_{i \rightarrow j}^{nop}$$

где $u_{i \rightarrow j}^{nop}$ - пороговая энергия для колебательного перехода $v=i \rightarrow v=j$.

Для расчета сечений процессов девозбуждения использовалось соотношение Клейна-Росселанда, выражающее принцип детального равновесия для процессов соударения первого и второго рода:

$$(u - u_{i \rightarrow j}^{nop})\sigma_{j \rightarrow i}(u - u_{i \rightarrow j}) = \exp(-u_{i \rightarrow j}^{nop})u\sigma_{i \rightarrow j}(u), \quad u \geq u_{i \rightarrow j} \quad (49)$$

Сечения возбуждения колебательных уровней основного терма, а также различных электронных состояний представлены на Рис. 1. С увеличением номера колебательного уровня, сечения процессов возбуждения уменьшаются, а их максимумы смещаются в сторону более высоких энергий.

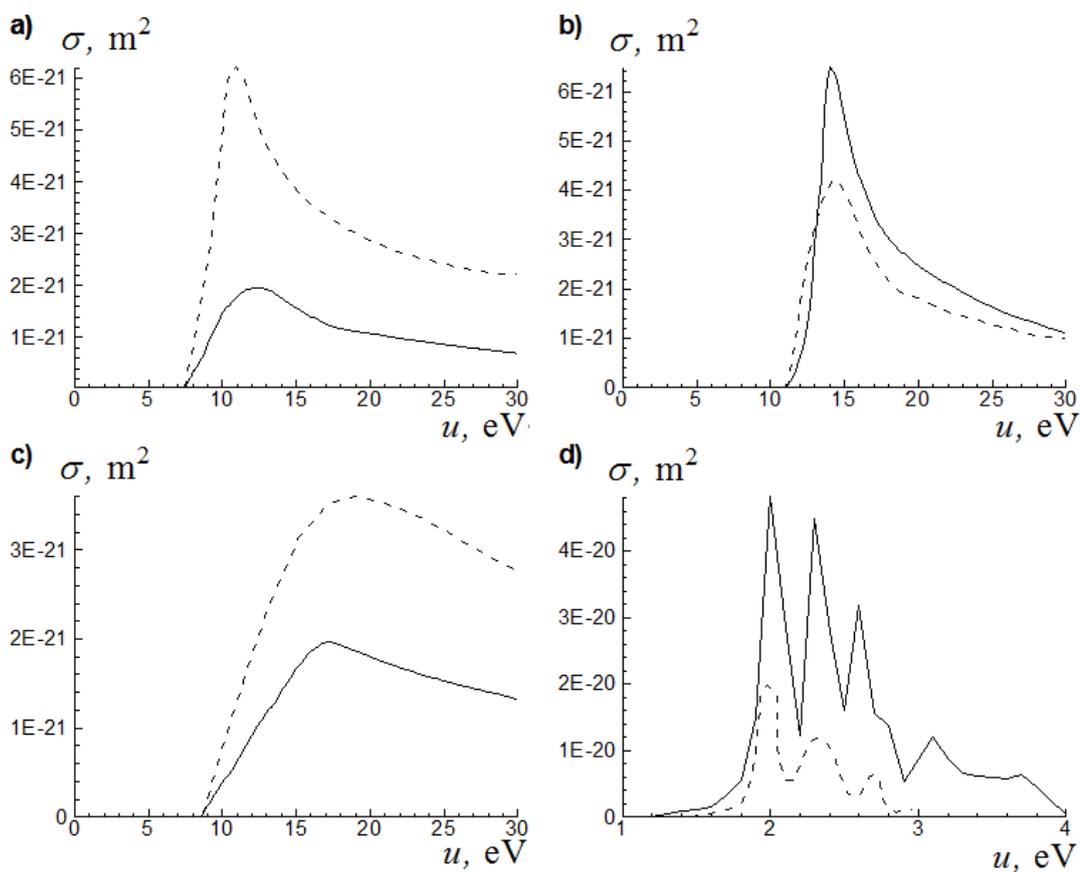


Рис. 1 Неупругие сечения возбуждения колебательных и электронных уровней молекулы, используемые в данной работе (сплошная линия) и в работах [27], [28] (пунктирная линия): а) $B^3\Pi_g$, б) $C^3\Pi$, в) $A^1\Pi$, д) $X^1\Sigma_g^+, v=0 \rightarrow v'=1$.

Результаты численного моделирования

Численное моделирование проводилось в плазме молекулярного азота для условий, характерных для положительного столба тлеющего разряда:

$$T_g = 300 \text{ К}, \frac{E}{N} = 60\text{-}200 \text{ Тд},$$

Функции распределения электронов по энергиям рассчитывалась двумя методами, суть которых изложена выше, сравнивалась скорость сходимости обоих методов, а также выполнялось сравнение полученных результатов с расчетами программой Bolsig+ [84] для того же набора сечений рассеяния.

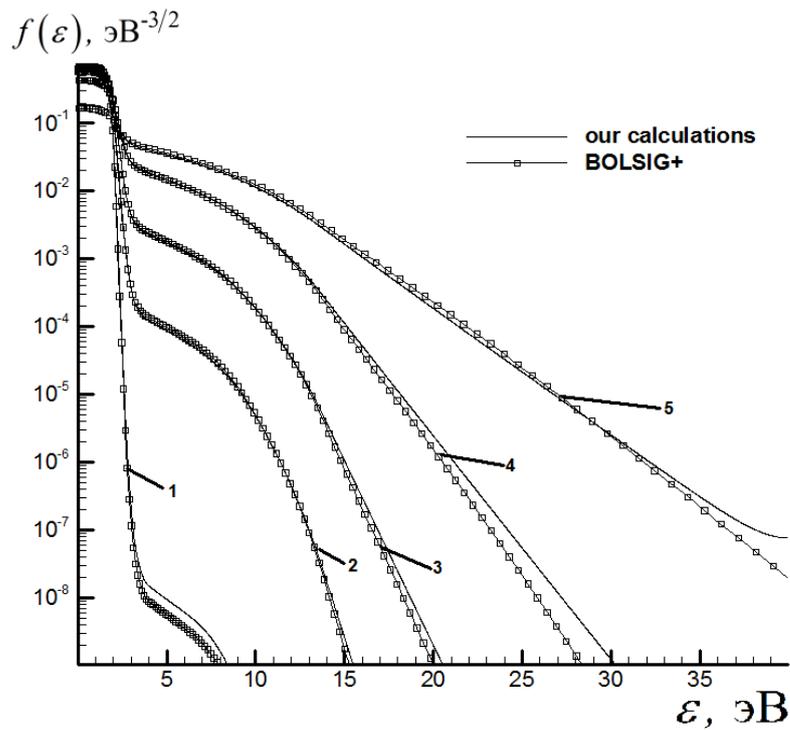


Рис. 2 Функция распределения электронов по энергиям при различных значениях $\frac{E}{N}$: $\frac{E}{N} = 20$ Тд (1), $\frac{E}{N} = 40$ Тд (2), $\frac{E}{N} = 60$ Тд (2), $\frac{E}{N} = 100$ Тд (3), $\frac{E}{N} = 200$ Тд (4).

Функция распределения рассчитывалась в диапазоне энергий $\varepsilon = 0-40$ эВ в $NE=160$ (400) точках, при этом интегрирование при расчете коэффициентов (35), (38), (46) проводилось на более подробных сетках для $NE=1600$ (4000) точек. В качестве начального приближения при решении систем (40) и (47) использовалось максвелловское распределение с температурой электронов $T_e = 0.5-0.8$ эВ.

a)

b)

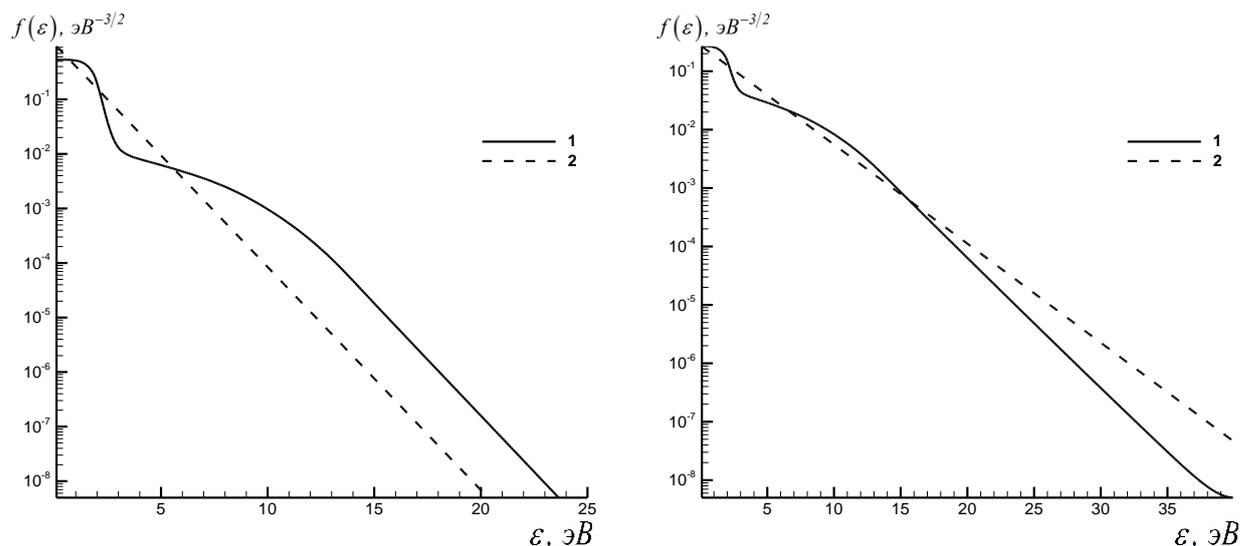


Рис. 3 Функция распределения электронов по энергиям при $\frac{E}{N} = 80$ Тд (а), и $\frac{E}{N} = 180$ Тд (б) 1 - решение уравнения Больцмана; 2- максвелловская функция распределения, с T_e , рассчитанной из (20).

На Рис. 2 и Рис. 3 представлены результаты расчетов ФРЭЭ, а также результаты расчетов программой BOLSIG+. На рисунках видно, что при увеличении $\frac{E}{N}$ значительно увеличивается число электронов в «хвосте» распределения. На Рис. 3 а и Рис. 3 б для сравнения даны также максвелловские функции распределения с T_e , рассчитанной из (20):

$$T_e = \frac{2}{3} \bar{\varepsilon}. \quad (50)$$

Видно, что полученные из решения кинетического уравнения Больцмана функции распределения значительно отличаются от максвелловских в различных участках спектра электронов. Рассчитанные на основе полученного решения кинетические параметры сравнивались с полуэмпирическими значениями этих коэффициентов, используемых в диффузионно-дрейфовых моделях газовых разрядов [85], [86].

На Рис. 4 представлены рассчитанные значения средней энергии и характеристической энергии $\frac{D_e}{\mu_e}$ электронов в зависимости от $\frac{E}{N}$. Полученные результаты сравниваются с полуэмпирическими данными из работы [87]:

$$\frac{T_e}{T} = 29.96 \ln \left(\frac{|\mathbf{E}|}{p} \right) + 24.64 \quad (51)$$

где T и p - температура и давление газа, $[\mathbf{E}/p] = \frac{\text{В}}{\text{см} \cdot \text{Тор}}$.

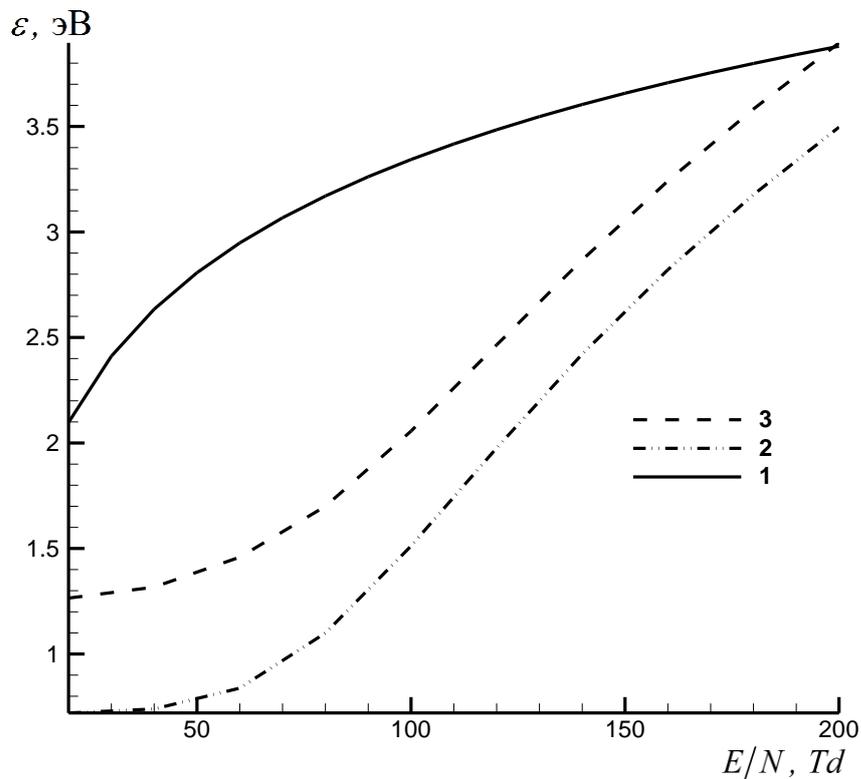


Рис. 4 Температура электронов ($T_e = \frac{2}{3} \bar{\varepsilon}$), характеристическая энергия ($\frac{D_e}{\mu_e}$) и полуэмпирические данные (51).

a)

b)

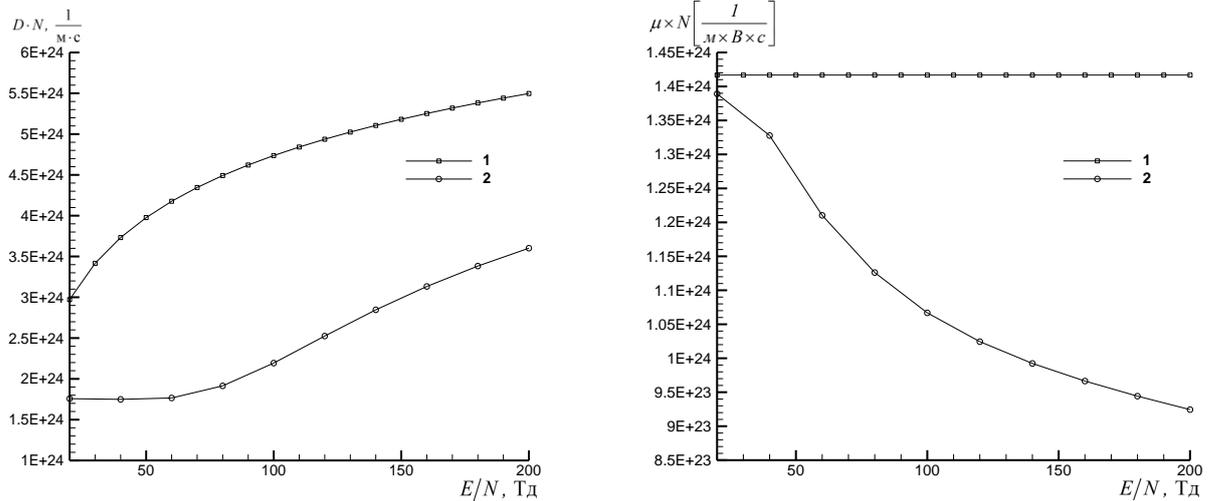


Рис. 5 Зависимость коэффициента диффузии а) электронов и их подвижности б) от $\frac{E}{N}$: 1 -данный расчет, 2 - эмпирическая формула (52).

На Рис. 5а Рис. 5б представлены результаты расчетов коэффициентов подвижности и диффузии электронов. Полученные результаты сравниваются с полуэмпирическими данными из работ [88]:

$$\mu_e p = 4.4 \times 10^5, \frac{\text{Тор} \cdot \text{см}^2}{\text{В} \cdot \text{с}} \quad (52)$$

$$D_e = \mu_e T_e$$

На Рис. 6 а Рис. 6 б представлены результаты расчетов коэффициентов (23) и (24) в уравнении сохранения энергии (19). На Рис. 6 с Рис. 6 д представлены результаты расчетов константы скорости ионизации и джоулева тепла. На Рис. 7 приведены также значения коэффициентов Таунсенда, рассчитанных из уравнения Больцмана, и полуэмпирические данные [88]:

$$\frac{\alpha}{p} = A \exp\left(-\frac{B}{E/p}\right), (\text{см} \cdot \text{Тор})^{-1}, \quad (53)$$

$$\text{где: } A = 12 (\text{см} \cdot \text{Тор})^{-1}, B = 342 \frac{\text{В}}{\text{см} \cdot \text{Тор}}.$$

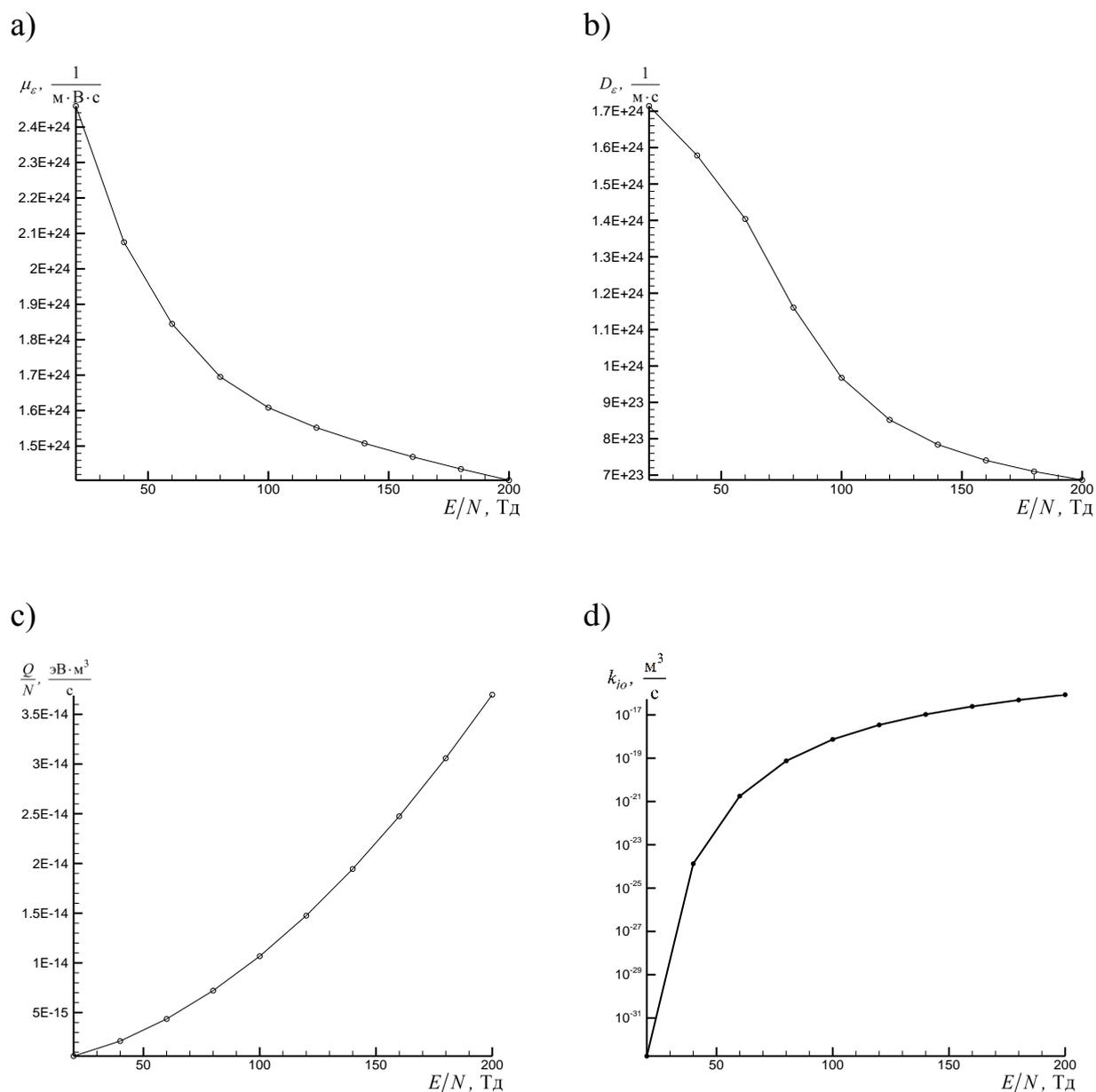


Рис. 6 Зависимость коэффициента μ_ε (a), D_ε (b), джоулева тепла ($Q = (jE)$) (c) и константы скорости ионизации (d) от $\frac{E}{N}$.

На Рис. 8 а приведены значения констант скорости для процессов возбуждения различных колебательных и электронных уровней молекулы азота. На Рис. 8 а видно, что с возрастанием $\frac{E}{N}$ константы скорости возбуждения электронных уровней А, В, С увеличиваются на несколько порядков. На Рис. 8 (b-d) также приведены коэффициенты Таунсенда процессов возбуждения различных электронных и колебательных уровней, а также скорость потерь энергии и доля

энергии по отношению к джоулеву теплу, затрачиваемая электронами на возбуждение молекул.

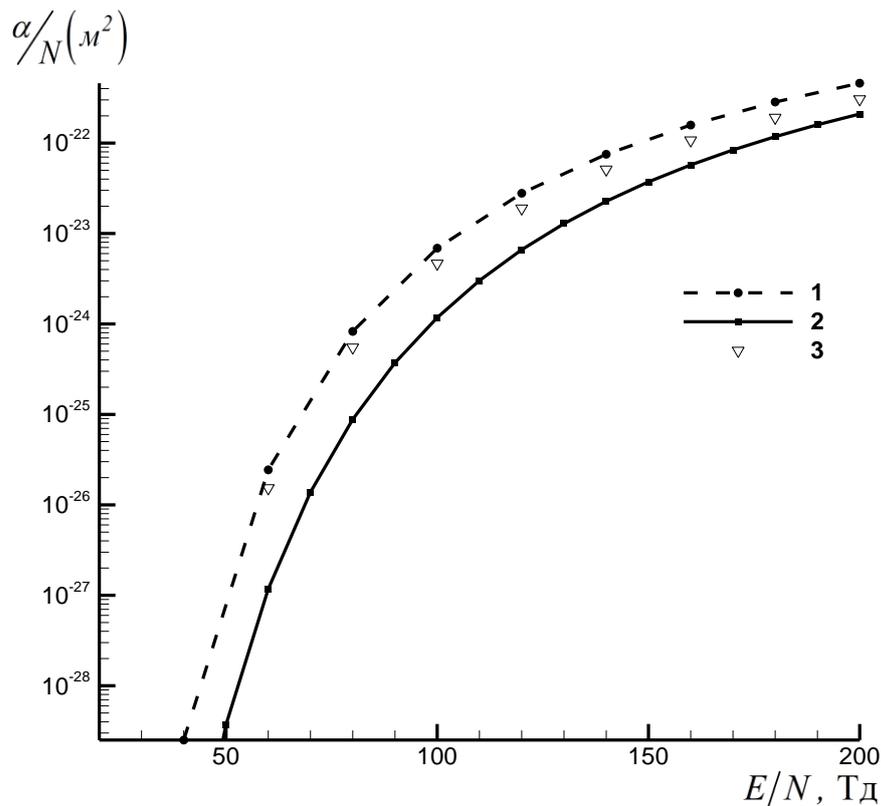


Рис. 7 Зависимость 1-го коэффициента Таунсенда (коэффициент ионизации) от $\frac{E}{N}$: 1 – данный расчет, 2- полуэмпирическое соотношение (53), 3 – расчет программой BOLSIG+.

В данной работе функция распределения рассчитывалась в диапазоне $\frac{E}{N} = 60-200$ Тд, характерных для плазмы положительного столба тлеющего разряда. При более высоких $\frac{E}{N}$ большую роль начинают играть процессы ионизации, поэтому при решении уравнения Больцмана необходимо учитывать интегралы столкновения для процессов ионизации, а также учитывать рост концентрации электронов. Помимо этого, значительно увеличивается количество электронно и колебательно-возбужденных молекул газа, поэтому на спектр электронов значительное влияние будут оказывать соударения второго рода с возбужденными молекулами. Для учета данных процессов кинетическое

уравнение Больцмана необходимо решать вместе с системой уравнений поуровневой кинетики для заселенностей колебательных состояний молекулярного азота.

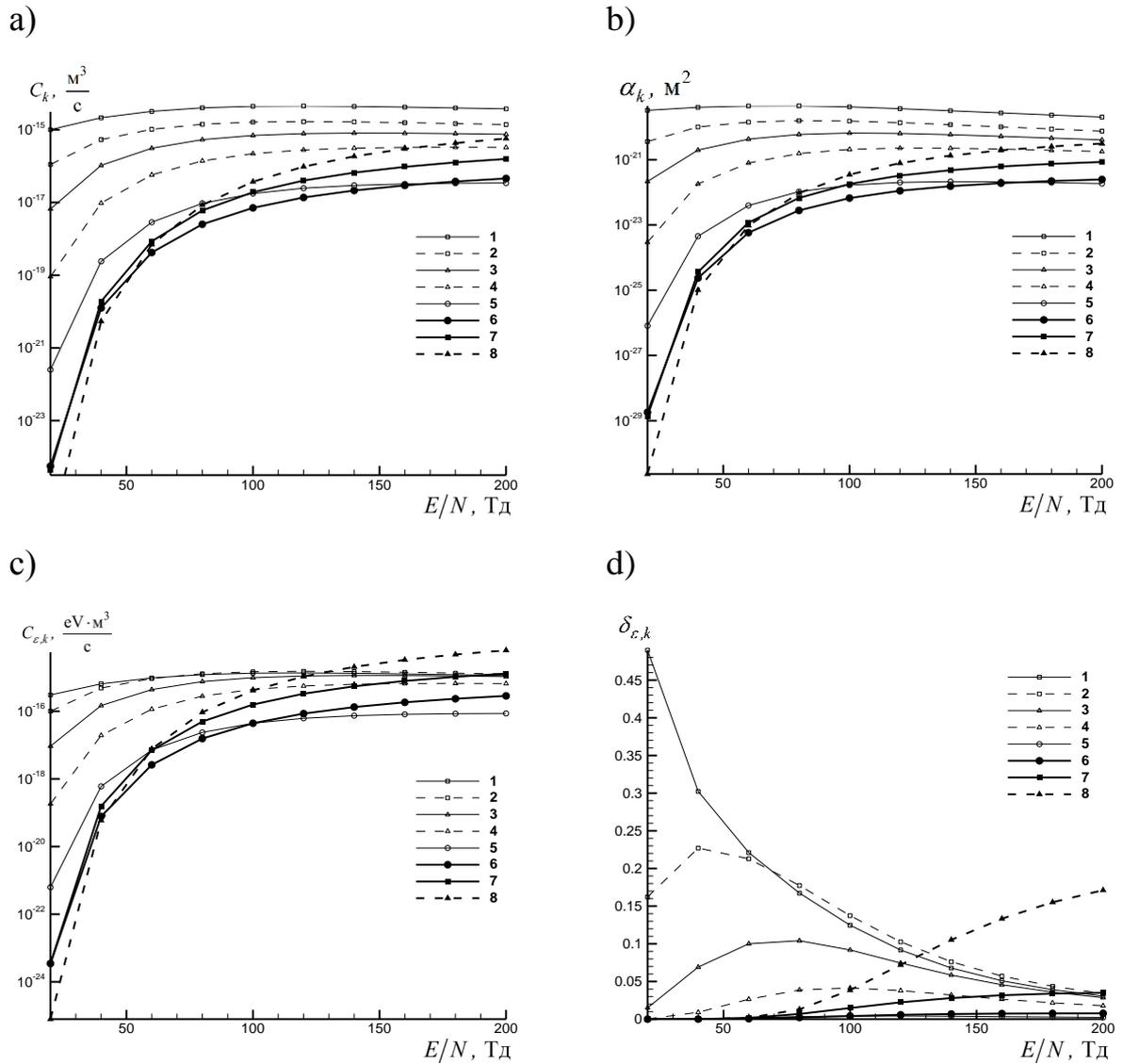


Рис. 8 Зависимость константы скорости (а), коэффициентов Таунсенда(б), скорости потерь энергии(с) и доли энергии (по отношению к джоулеву теплу), теряемой электронами на возбуждение внутренних степеней свободы для различных колебательных и электронных уровней молекулы азота: $\nu=1$ (1); $\nu=3$ (2); $\nu=5$ (3); $\nu=7$ (4); $\nu=9$ (5); $N_2(A^3\Sigma_u^+, \nu)$, $\nu=0-4$ (6); $N_2(B^3\Pi_g^+)$ (7); $N_2(C^3\Pi_u^+)$ (8).

2.5. Описание кинетической модели и предварительные результаты численного моделирования компонентного состава плазмы в молекулярном азоте

Постановка задачи

Модель кинетики возбуждения молекулярного азота в плазме тлеющего разряда должна учитывать следующие основные физико-химические процессы: возбуждение молекул электронным ударом, VV – обмен и VT- релаксацию, химические реакции между электронно-возбужденными состояниями молекул. При этом константы скорости данных процессов сильно зависят от температуры газа и энергетического спектра электронов в плазме. В данной главе выполнен расчет заселенности колебательных и электронных состояний молекулярного азота в плазме тлеющего разряда посредством решения «кинетических» поуровневых уравнений описывающих данные процессы.

Кинетическая схема, используемая для описания процессов физико-химической кинетики в тлеющем разряде, включает в себя набор реакций между 47 колебательно-возбужденными уровнями основного электронного состояния молекулярного азота:

$$N_2(X^1\Sigma_g^+, v), v=0-47.$$

Все расчеты проводились с использованием равновесной и неравновесной функции распределения электронов по энергиям

В случае, если для электронной компоненты плазмы имеет место локальное термодинамическое равновесие (ЛТР), распределение электронов по энергиям считалось максвелловским:

$$f(u) = 2 \sqrt{\frac{u}{\pi (kT_e)^3}} \exp\left(-\frac{u}{kT_e}\right), \text{ эВ}^{-1}$$

где u и T_e - тепловая энергия и температура электронов. Заметим, что спектр электронов близок к максвелловскому, если частота электрон-электронных столкновений значительно превышает частоту потерь энергии в неупругих столкновениях. В случае, если это условие не выполняется, и имеет место отклонение от ЛТР, что чаще всего реализуется в катодном слое, для расчета функции распределения электронов по энергиям решалось кинетическое уравнение Больцмана, метод решения которого описан в главе Глава 2.

Для расчета заселенностей колебательных уровней молекул азота были выбраны следующие параметры, характерные для положительного столба тлеющего разряда:

$$p = 2 \text{ Тор}, \quad E/N = 70 \text{ Тд}, \quad T = 500 \text{ К},$$

$$T_e = 1.0 \text{ эВ}, \quad N_e = 2 \times 10^{10} \text{ см}^{-3},$$

где p , T , N , - давление, температура и плотность азота, T_e , N_e , - температура и концентрация электронов в плазме тлеющего разряда, E - напряженность электрического поля.

Колебательная кинетика молекул азота в основном электронном состоянии $N_2(X^1\Sigma_g^+, \nu)$ (далее для краткости используется обозначение $N_2(X, \nu)$) описывается в рамках поуровневой кинетики ангармонических осцилляторов, учитывающей процессы возбуждения колебаний электронным ударом (eV), а также колебательно-колебательные (VV) и колебательно-поступательные (VT) процессы энергообмена в приближении одноквантовых переходов [89]:

$$e + N_2(X, n) = e + N_2(X, m) \tag{54}$$

$$N_2(X, n) + N_2(X, m) = N_2(X, n-1) + N_2(X, m+1) \tag{55}$$

$$N_2(X, n) + N_2 = N_2(X, n-1) + N_2 \tag{56}$$

Колебательное возбуждение молекул электронным ударом (eV)

При описании возбуждения и опустошения колебательных уровней электронным ударом учитывались первые 11 колебательных уровней азота. Константы скорости для этого процесса рассчитывались как свертка экспериментально (либо теоретически) полученных сечений возбуждения с ФРЭЭ:

$$K_{n \rightarrow m}^e = \sqrt{\frac{2}{\mu_0}} \int_0^{\infty} \sqrt{u} \sigma_{n \rightarrow m} f(u) du \quad (57)$$

где μ - приведенная масса сталкивающихся частиц, $\sigma_{n \rightarrow m}$ - сечение процесса (54). В данной работе использовалась база данных по сечениям [83], где содержатся сечения возбуждения для реакции:



Данный набор сечений также описан в [19]. Для расчета сечений процессов возбуждения с более высоких колебательных уровней использовалась методика, описанная в работе [81]:

$$\sigma_{i \rightarrow j}(u) = \sigma_{0 \rightarrow j-i}(u + d),$$

$$\text{где } d = U_{0 \rightarrow j-i}^{nop} - U_{i \rightarrow j}^{nop} \quad (58)$$

Константы скорости процессов девозбуждения электронным ударом рассчитывались из принципа детального равновесия:

$$g_n C_{n \rightarrow m}^e = g_m C_{m \rightarrow n}^e \exp(-\beta), \quad (59)$$

где $\beta = \frac{W}{kT_e}$, $W = E_n - E_m$, g_n, g_m - статистический вес, а E_n, E_m - уровни энергии состояний n и m.

Таким образом, процессы возбуждения молекул азота электронным ударом описываются следующим кинетическим уравнением:

$$\frac{dN_2(X, n)}{dt} = n_e \sum_{m < n} N_2(X, m) C_{m \rightarrow n}^e + n_e \sum_{m > n} N_2(X, m) C_{m \rightarrow n}^e - n_e N_2(X, n) \left(\sum_{m < n} C_{n \rightarrow m}^e + \sum_{m > n} C_{n \rightarrow m}^e \right)$$

Колебательный энергообмен (VV)

Колебательно-возбужденные молекулы активно обмениваются энергией в столкновениях. При этом наиболее интенсивно происходит колебательный энергообмен в одноквантовых переходах. Одной из наиболее популярных теорий, описывающих колебательный энергообмен, является теория Шварца-Славского-Герцфельда (SSH), согласно которой константы скорости VT-процессов для перехода $m \rightarrow m-1$ определяются следующими выражениями:

$$k_{m, m-1}(T) = S_{at} f_{at} Z_v^{AB} Z_{tr} Z$$

$$Z = \pi R_0^2 (8kT/\pi\mu)^{1/2}$$

$$\mu = m_{AB} m_M / (m_{AB} + m_M)$$

$$Z_v^{AB} = \frac{1}{[\hbar]^2} \frac{\max[(m-1), m]!}{\min[(m-1), m]!} \times \left[\frac{\hbar\alpha^2}{2m_{AB}\omega_0^{AB}} \right]^{|l|}$$

Полуэмпирическая формула Кекка и Карриера:

$$Z_{tr} = \frac{8}{\pi^2} \left(\frac{\theta_{LT}}{T} \right) \left(\frac{\theta_v}{T} \right)^{-2} \left\{ 3 - \exp \left[-\frac{2}{3} \left(\frac{\theta_{LT}}{T} \right)^{1/2} \right] \right\} \exp \left[-\frac{2}{3} \left(\frac{\theta_{LT}}{T} \right)^{1/2} \right] \exp \left[\frac{\theta_v}{T} \right]$$

$$\theta_{LT} = \frac{\pi\mu\Delta E^2}{2\alpha^2 kh^2}, S_{st} = 1/3, f_{at} = \exp(W_0/kT), W_0 = \epsilon_m$$

Константы скорости VV-процессов для перехода $m \rightarrow m-1, n \rightarrow n+r$ определяются следующими выражениями:

$$k_{m,m-1}^{n,n+r}(T) = S_{st} f_{at} Z_{v}^{AB} Z_{v}^{CD} Z_{tr} Z$$

$$Z = \pi R_0^2 (8kT/\pi\mu)^{1/2}$$

$$\mu = m_{AB} m_{CD} / (m_{AB} + m_{CD}), S_{st} = \frac{1}{9}, f_{at} = \exp(W_0/kT), W_0 = \epsilon_m$$

$$Z_{v}^{AB} Z_{v}^{CD} = \left[\frac{1}{|r|!|l|!} \right]^2 \frac{\max[(n+r), n]! \max[(m-1), m]!}{\min[(n+r), n]! \min[(m-1), m]!} \times$$

$$\left[\frac{h\alpha^2}{2m_{AB}\omega_0^{AB}} \right]^{|l|} \left[\frac{h\alpha^2}{2m_{CD}\omega_0^{CD}} \right]^{|r|}$$

$$Z_{tr} = \frac{16}{\pi^2} \left(\frac{\theta_{LT}}{\theta_v} \right)^2 \int_0^\infty \frac{e^{-z} dz}{\text{sh}^2 \left\{ (2\theta_{LT}^{1/2} T^{1/2} / \theta_v) \left[(z + \theta_v/T)^{1/2} - z^{1/2} \right] \right\}}$$

$$\theta_{LT} = \frac{\pi\mu\Delta E^2}{2\alpha^2 kh^2}, \theta_v = \frac{\Delta E}{k}$$

$$\Delta E = hc \left[\omega_{e1} \left(m + \frac{1}{2} \right) - (\omega_e x_e)_1 \left(m + \frac{1}{2} \right)^2 + \omega_{e2} \left(n + \frac{1}{2} \right) - (\omega_e x_e)_2 \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \right] -$$

$$hc \left[\omega_{e1} \left(m-1 + \frac{1}{2} \right) - (\omega_e x_e)_1 \left(m-1 + \frac{1}{2} \right)^2 + \omega_{e2} \left(n+r + \frac{1}{2} \right) - (\omega_e x_e)_2 \left(n+r + \frac{1}{2} \right)^2 \right]$$

где m_{AB} , m_M - массы молекулы АВ и М соответственно, μ - приведенная масса сталкивающихся частиц, ω_0 - круговая частота молекулы АВ для перехода $1 \rightarrow 0$ ($\omega_0 = 2\pi c(\omega_e - 2\omega_e x_e)$), r , r_e - текущее межъядерное расстояние и межъядерное расстояние молекулы АВ в состоянии равновесия, R - расстояние между частицей М и центром масс молекулы АВ, R_0 - газокинетический радиус столкновения АВ-М, σ , ϵ_m - параметры потенциала Леннард-Джонса для взаимодействия АВ-М, W_0 - глубина ямы в потенциале взаимодействия АВ-М, α - обратный радиус в экспоненциальном отталкивательном потенциале межмолекулярного взаимодействия Борна-Майера, θ_v - характеристическая колебательная температура, θ_{LT} - характеристическая температура Ландау-Теллера, S_{st} - стерический фактор учета влияния анизотропии потенциала межмолекулярного взаимодействия, f_{at} - фактор учета притяжения, Z_v - колебательный фактор учета связи колебаний с поступательным движением молекулы, Z_{tr} - трансляционный фактор, определяющий температурную зависимость вероятности колебательного перехода.

Основным параметром теории является параметр α - обратный радиус взаимодействия по Борну-Майеру, принимающий значения в диапазоне $3.5-4.5 \left(\overset{\circ}{\text{A}} \right)^{-1}$.

Погрешность модели SSH в основном связана с недостаточным знанием параметров потенциала взаимодействия, поскольку результат чувствителен к величине обратного радиуса взаимодействия α . Если параметр известен с высокой точностью, например, из экспоненциальной аппроксимации поверхности потенциальной энергии, полученной методами квантовой химии, то точность константы скорости улучшается до множителя 2-3. Погрешность констант скорости многоквантовых переходов, даваемых теорией SSH, существенно выше и может составлять более 2-х порядков по величине.

В данной главе для расчета констант скорости одноквантового колебательного энергообмена молекул азота при расчете колебательной функции распределения используются следующие выражения [89], [90]:

$$K_{n+1,n}^{m,m+1} = (m+1)(n+1)K_{1,0}^{0,1} \exp(-\delta_{VV} |n-m|) \times \left[\frac{3}{2} - \frac{1}{2} \exp(-\delta_{VV} |n-m|) \right] \exp\left(|n-m| \frac{hc\omega_e \chi_e}{kT} \right),$$

$$K_{n,n+1}^{m+1,m} = K_{n+1,n}^{m,m+1} \exp\left(\frac{2(n-m)hc\omega_e \chi_e}{kT} \right),$$

$$\delta_{VV} = \frac{4\pi}{3} \frac{\omega_e \chi_e}{\alpha} \sqrt{\frac{\mu}{2kT}},$$

$$K_{1,0}^{0,1} \approx 2.87 \times 10^{-17} T^{3/2}, \frac{\text{см}^3}{\text{с}} \text{ [91]}, \quad \alpha = 4.0 \times 10^8, \text{ см}^{-1} \text{ [92]}$$

При этом изменение концентрации колебательно-возбужденных молекул за счет VV-обмена будет описываться следующим кинетическим уравнением:

$$\begin{aligned} \frac{dN_2(X,n)}{dt} = & N_2(X,n-1) \sum_{m>0} N_2(X,m) K_{n-1,n}^{m+1,m} + \\ & + N_2(X,n+1) \sum_m N_2(X,m) K_{n+1,n}^{m,m+1} - N_2(X,n) \sum_m N_2(X,m) K_{n,n-1}^{m,m+1} - \\ & - N_2(X,n) \sum_m N_2(X,m+1) K_{n,n+1}^{m-1,m} \end{aligned}$$

VT - релаксация

Хорошо известно, что колебательно-возбужденные молекулы активно сбрасывают энергию в поступательные степени свободы (VT- релаксация). Как и для реакции VV-обмена константы скорости процессов VT-релаксации могут быть описаны теорией SSH:

$$P_{n+1,n}(T) = (n+1)P_{1,0} \exp(n\delta_{VT}) \exp\left(-\frac{nhc\omega_e\chi_e}{kT}\right),$$

$$P_{n,n+1}(T) = P_{n+1,n}(T) \exp\left(-\frac{(\omega_e - 2\omega_e\chi_e)hc}{kT}\right) \times$$

$$\times \exp\left(-\frac{2nhc\omega_e\chi_e}{kT}\right),$$

$$P_{0,1}(T) = P_{1,0}(T) \exp\left(-\frac{(\omega_e - 2\omega_e\chi_e)hc}{kT}\right),$$

$$\delta_{VT} = \begin{cases} \frac{4\pi}{3} \frac{\omega_e\chi_e}{\alpha} \sqrt{\frac{\mu}{2kT}} & , \gamma_n < 20 \\ 4 \left[\frac{\pi(\omega_e - 2\omega_e\chi_e)}{\alpha} \sqrt{\frac{\mu}{2kT}} \right]^{2/3} & , \gamma_n \geq 20 \end{cases}$$

$$\gamma_n = \frac{\pi(\omega_e - 2\omega_e\chi_e(n+1))}{\alpha} \sqrt{\frac{\mu}{kT}},$$

$$P_{0,1} = 2.16 \times 10^{-12} \sqrt{T} \exp(-147.43T^{-1/3}), \quad \frac{\text{см}^3}{\text{с}} \quad [91]$$

Изменение КФР молекул азота при этом описывается следующими кинетическими уравнениями:

$$\begin{aligned} \frac{dN_2(X,n)}{dt} = & N_2(X,n-1)[N_2]P_{n-1,n} + \\ & + N_2(X,n+1)[N_2]P_{n+1,n} - N_2(X,n)[N_2]P_{n,n-1} - N_2(X,n)[N_2]P_{n,n+1} \end{aligned}$$

Кинетика электронно-возбужденных состояний

Табл. 13 Кинетическая схема, используемая при расчете заселенностей колебательных и электронных состояний молекул азота.

Реакция	Константа скорости
$N_2(X^1\Sigma_g^+, \nu'') + e \leftrightarrow N_2(X^1\Sigma_g^+, \nu') + e, \nu'', \nu' = 0-10$	$f(E/N)$
$N_2(X^1\Sigma_g^+, \nu'') + e \leftrightarrow N_2(A^3\Sigma_u^+, \nu') + e, \nu'' = 0, \nu' = 0-4$	$f(E/N)$
$N_2(X^1\Sigma_g^+, \nu'') + e \leftrightarrow N_2(A^3\Sigma_u^+, \nu') + e, \nu'' = 0, \nu' = 5-9$	$f(E/N)$
$N_2(X^1\Sigma_g^+, \nu'') + e \leftrightarrow N_2(B^3\Pi_g) + e, \nu'' = 0$	$f(E/N)$
$N_2(X^1\Sigma_g^+, \nu'') + e \leftrightarrow N_2(C^3\Pi_u^+) + e, \nu'' = 0$	$f(E/N)$
$N_2(A^3\Sigma_u^+) + N_2(A^3\Sigma_u^+) \leftrightarrow N_2(B^3\Pi_g) + N_2(X^1\Sigma_g^+, 8)$	[83]
$N_2(A^3\Sigma_u^+) + N_2(A^3\Sigma_u^+) \leftrightarrow N_2(C^3\Pi_u^+) + N_2(X^1\Sigma_g^+, 2)$	[83]
$N_2(A^3\Sigma_u^+) + N_2(X^1\Sigma_g^+, \nu'') \leftrightarrow N_2(B^3\Pi_g) + N_2(X^1\Sigma_g^+, \nu'), 5 \leq \nu'' \leq 14, \nu' = 0$	[83]
$N_2(A^3\Sigma_u^+) + N_2(X^1\Sigma_g^+, \nu'') \leftrightarrow N_2(X^1\Sigma_g^+, \nu') + 2N, 14 \leq \nu'' \leq 19, \nu' = 0$	[83]
$N_2(B^3\Pi_g) + N_2 \leftrightarrow N_2(A^3\Sigma_u^+) + N_2$	[83]
$N_2(B^3\Pi_g) + N_2 \leftrightarrow N_2(X^1\Sigma_g^+, 0) + N_2$	[83]
$N_2(B^3\Pi_g) \rightarrow N_2(A^3\Sigma_u^+) + h\nu$	[83]
$N_2(C^3\Pi_u^+) \rightarrow N_2(B^3\Pi_g) + h\nu$	[83]

Помимо кинетики заселения колебательно возбужденных состояний основного электронного терма молекулы азота в данной работе рассчитываются концентрации различных электронно-возбужденных состояний $N_2(A^3\Sigma_u^+)$, $N_2(B^3\Pi_g)$, $N_2(C^3\Pi_u^+)$. Уравнения используемой кинетической модели включают возбуждение данных электронных состояний электронным ударом, а также химические реакции между электронно- и колебательно-возбужденными молекулами. Список реакций, используемых в данной работе для расчета

концентрации состояний $N_2(A^3\Sigma_u^+)$, $N_2(B^3\Pi_g)$, $N_2(C^3\Pi_u^+)$, представлен в Табл. 13.

Константы скорости процессов возбуждения молекул электронным ударом рассчитывались как свертка соответствующих сечений рассеяния электрона на молекулах с функцией распределения электронов по энергиям. Константы скорости взаимодействия электронно- и колебательно-возбужденных состояний были взяты из работы [83].

Расчет неравновесной ФРЭЭ

Отклонение функции распределения электронов по энергиям от максвелловской становится тем больше, чем выше E/N . Для того, чтобы учесть влияние неравновесной ФРЭЭ на кинетические параметры плазмы в тлеющем разряде, решается кинетическое уравнение Больцмана. В данной работе кинетическое уравнение Больцмана решается в лоренцевом приближении:

$$\frac{E^2}{3} \frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{u}{N\sigma_{el}} \frac{\partial f}{\partial u} \right) + \frac{2m}{M} \frac{\partial}{\partial u} (u^2 N \sigma_{el} f) + \frac{2mkT}{Me} \frac{\partial}{\partial u} \left(u^2 N \sigma_{el} \frac{\partial f}{\partial u} \right) = C_0 \quad (60)$$

$$C_0 = uf(u)N \sum_j \sigma_j(u) - \sum_j (u+u_j) f(u+u_j) N \sigma_j(u+u_j) + \\ + uf(u)N \sum_j \sigma_{-j}(u) - \sum_j (u-u_j) f(u-u_j) N \sigma_{-j}(u-u_j) \quad (61)$$

$u = \frac{mv^2}{2e}$, где v, e, m - скорость, заряд и масса электронов, M, N, T - масса,

концентрация и температура молекул азота, E - напряженность электрического поля, σ_{el} - сечения упругих столкновений, σ_j, σ_{-j} - сечения процессов возбуждения и девозбуждения колебательных состояний основного электронного терма, а также различных электронных состояний молекулы N_2 . ФРЭЭ нормирована условием:

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

Для расчета сечений процессов девозбуждения использовалось соотношение Клейна-Росселанда, выражающее принцип детального равновесия для процессов соударения первого и второго рода:

$$(u - u_j) \sigma_{-j}(u - u_j) = \exp(-u_j) u \sigma_j(u), \quad u \geq u_j$$

Табл. 14 Кинетическая схема, используемая при расчете ФРЭЭ.

Реакция	Пороговая энергия, эВ
$N_2(X^1\Sigma_g^+, \nu'') + e \leftrightarrow N_2(X^1\Sigma_g^+, \nu') + e, \nu'', \nu' = 0-10$	<6.2
$N_2(X^1\Sigma_g^+, \nu'') + e \leftrightarrow N_2(A^3\Sigma_u^+, \nu') + e, \nu'' = 0, \nu' = 0-4$	6.2
$N_2(X^1\Sigma_g^+, \nu'') + e \leftrightarrow N_2(A^3\Sigma_u^+, \nu') + e, \nu'' = 0, \nu' = 5-9$	7
$N_2(X^1\Sigma_g^+, \nu'') + e \leftrightarrow N_2(A^3\Sigma_u^+, \nu') + e, \nu'' = 0, \nu' > 9$	7.8
$N_2(X^1\Sigma_g^+, \nu'') + e \leftrightarrow N_2(B^3\Pi_g) + e, \nu'' = 0$	7.4
$N_2(X^1\Sigma_g^+, \nu'') + e \leftrightarrow N_2(C^3\Pi_u) + e, \nu'' = 0$	11
$N_2(X^1\Sigma_g^+, \nu'') + e \leftrightarrow N_2(W^3\Delta_u) + e, \nu'' = 0$	7.4
$N_2(X^1\Sigma_g^+, \nu'') + e \leftrightarrow N_2(B^3\Sigma_u^-) + e, \nu'' = 0$	8.2
$N_2(X^1\Sigma_g^+, \nu'') + e \leftrightarrow N_2(a^1\Sigma_u^-) + e, \nu'' = 0$	8.4
$N_2(X^1\Sigma_g^+, \nu'') + e \leftrightarrow N_2(a^1\Pi_g) + e, \nu'' = 0$	8.6
$N_2(X^1\Sigma_g^+, \nu'') + e \leftrightarrow N_2(W^1D_u) + e, \nu'' = 0$	8.9
$N_2(X^1\Sigma_g^+, \nu'') + e \leftrightarrow N_2(E^3\Sigma_g^+) + e, \nu'' = 0$	11.9
$N_2(X^1\Sigma_g^+, \nu'') + e \leftrightarrow N_2(a^1\Sigma_g^+) + e, \nu'' = 0$	12.3

Уравнение (60) решалось методом, изложенным в главе 2.3. В расчете учитывались процессы возбуждения следующих состояний:

$$N_2(X^1\Sigma_g^+, v), v=0-10; N_2(A^3\Sigma_u^+, v), v=0-4; N_2(A^3\Sigma_u^+, v), v=5-9; N_2(B^3\Pi_g^+);$$

$$N_2(C^3\Pi_u^+); N_2(W^3D_u); N_2(A^3\Sigma_u^+, v), v>9; N_2(B^3\Sigma_u^-); N_2(a^1\Sigma_u^-); N_2(a^1\Pi_g);$$

$$N_2(W^1D_u); N_2(E^3\Sigma_g^+); N_2(a^1\Sigma_g^+);$$

На основе полученного решения кинетического уравнения Больцмана рассчитывались константы скорости возбуждения и девозбуждения колебательных либо электронных уровней молекул азота:

$$k_k = \gamma \int_0^{\infty} u \sigma_k(u) f_0(u) du, \quad \gamma = (2e/m)^{1/2}$$

где e , m - заряд и масса электрона, $\sigma_k(u)$ - сечение возбуждения внутренних степеней свободы молекулы N_2 , k - номер колебательного, или электронного уровня.

Результаты численного моделирования

В данном разделе приводятся результаты расчета констант скорости и заселенностей возбужденных состояний молекул азота на основе описанной в данной главе модели. На Рис. 9 представлены данные по значению констант скорости VV и VT процессов при различных температурах. На Рис. 10 и Рис. 11 приведены результаты расчета константы скорости возбуждения различных колебательных степеней свободы молекулы азота в зависимости от температуры (для равновесной ФРЭЭ) и в зависимости от приведенного поля (для неравновесной, рассчитанной из решения кинетического уравнения Больцмана, ФРЭЭ). На Рис. 12 представлены результаты расчета констант скорости для ударов второго рода. На Рис. 13 приведены результаты расчетов заселенностей колебательных уровней молекул азота и сравнение их с результатами расчетов в работе [26]. На Рис. 13 также показаны больцмановское и триноровское распределения при $T_v = 5000$ К, полученной экспериментально по заселенностям

первых двух уровней в работе [26]. Расчеты колебательной кинетики проводились на временном интервале $t = 11$ мс, что также соответствует работе [26].

Доля колебательно возбужденных молекул азота в данном случае рассчитывалась по формуле:

$$\theta = \frac{\sum_{v=1}^{47} N_2(X^1\Sigma_g^+, v)}{N}, \text{ где } N = \frac{p}{kT}$$

Для выбранных параметров разряда, доля колебательно возбужденных молекул составляет $\theta \approx 62\%$.

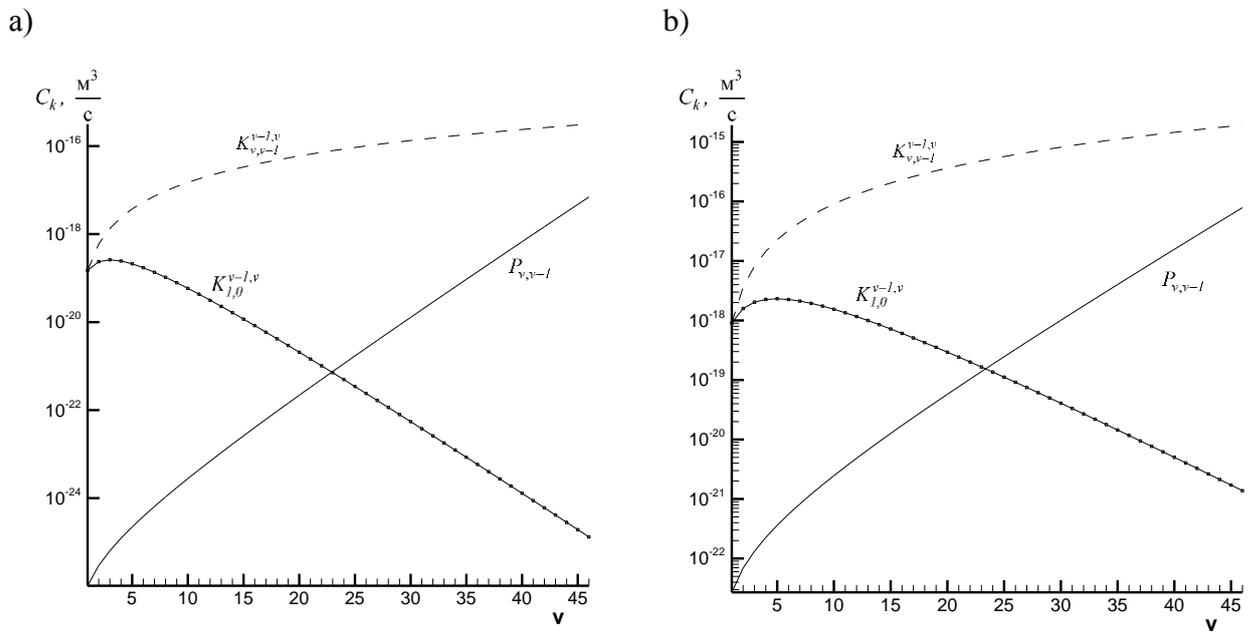


Рис. 9 Зависимость констант скорости VV- и VT- процессов от номера колебательного уровня при $T_g = 300$ К (а) и $T_g = 1000$ К (б).

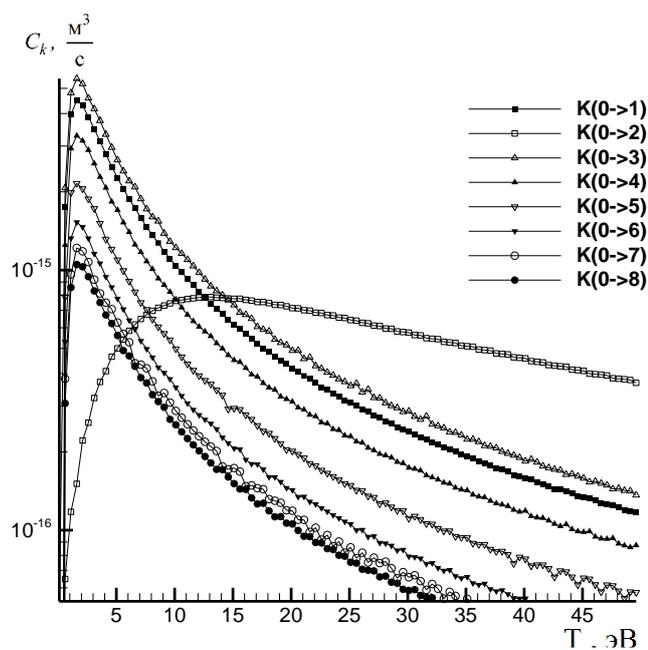


Рис. 10 Зависимость констант скорости возбуждения молекул электронным ударом в зависимости от температуры электронов.

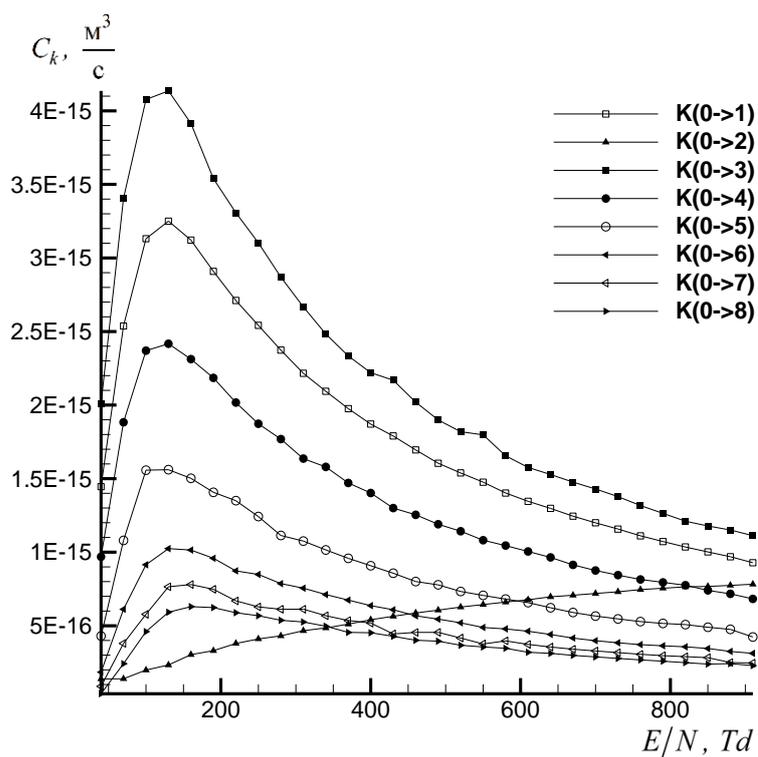


Рис. 11 Зависимость констант скорости возбуждения молекул электронным ударом в зависимости от приведенного поля.

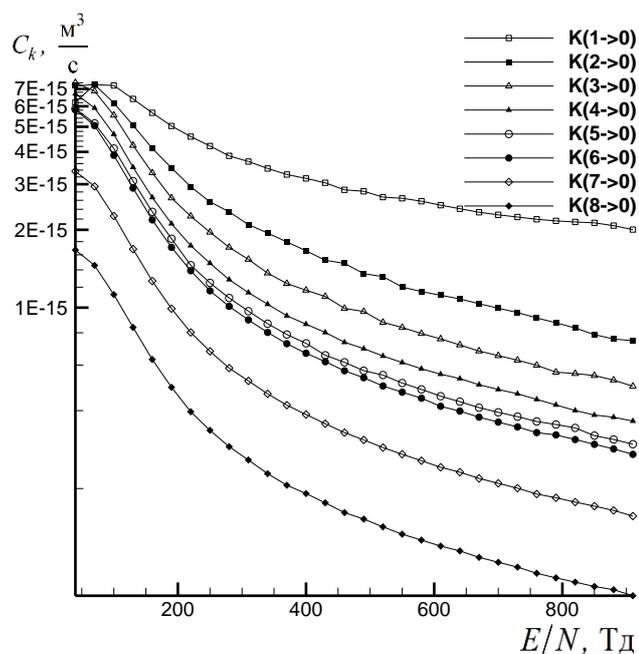


Рис. 12 Зависимость констант скорости девозбуждения молекул электронным ударом в зависимости от приведенного поля.

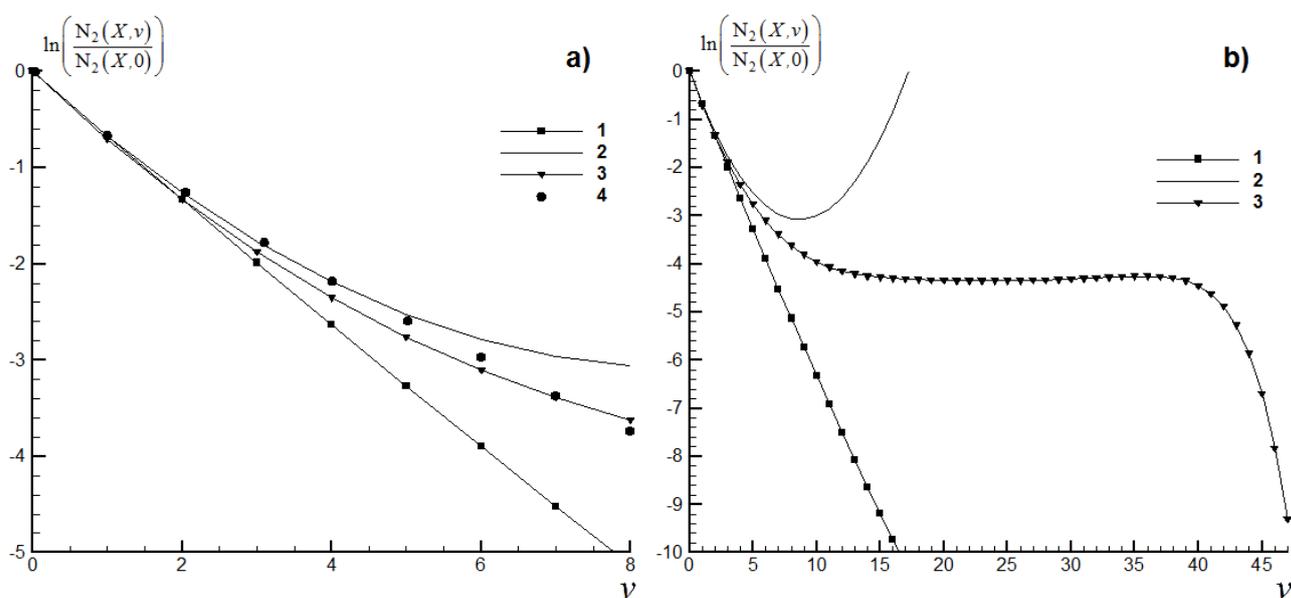


Рис. 13 Колебательная функция распределения молекул азота в плазме тлеющего разряда при $p = 2$ Тор, $T = 500$ К, $N_e = 2 \times 10^{10}$ см⁻³ для первых 8 (а) и 47 (б) колебательных уровней основного состояния: 1 - больцмановское распределение, $T_v = 5000$ К, 2 – триноровское распределение, $T_v = 5000$ К, $T = 500$ К, 3 – данный расчет, 4 – результаты расчета [26].

Глава 3. Кинетика плазмохимических процессов с участием водорода в механике пеннинговского разряда

3.1. Введение

Возросший в последнее время интерес к исследованию кинетики молекулярного водорода и его изотопов в низкотемпературной плазме пеннинговского разряда связан в первую очередь с разработкой таких электрофизических приборов, как генераторы нейтронов и источники ионов [93]–[96]. Одной из наиболее важных характеристик, определяющих эффективность работы данных электрофизических приборов, является химический состав образующейся в пеннинговском разряде плазмы, а именно концентрация атомарных и молекулярных ионов водорода, а также его изотопов, образующихся в таких устройствах. Компонентный состав плазмы пеннинговского разряда зависит от характерной энергии заряженных частиц (электронов и ионов), набираемой ими в скрещенных электрическом и магнитном полях, а также определяется скоростью обмена этой энергией с нейтральными молекулами газа.

Имеющиеся в настоящее время работы по численному моделированию атомно-молекулярного состава плазмы в источниках ионов касаются, в основном, устройств с высоким газоразрядным током, используемых в термоядерных реакторах, а также источников ионов H^+ [50], [93]. При этом применение для расчета характеристик разряда требовательных к вычислительным ресурсам 2D и 3D PIC моделей, делает затруднительным использование подробных кинетических схем для расчета компонентного состава плазмы. В то же время в газонаполненных нейтронных трубках часто используются источники ионов с относительно невысоким током ($I = 0.1-2$ мА), текущим через пеннинговский разряд. В связи с этим в данной главе рассматривается задача о расчете атомно-молекулярного состава плазмы пеннинговского разряда с использованием подробного «уровневого» описания в нульмерном приближении.

В данной главе рассматривается пеннинговский разряд при давлениях $p \approx 10^{-3} - 10^{-2}$ Тор. Разность потенциалов, приложенная между катодом и анодом, составляет $\varphi = 1-3$ кВ. При этом ток через разряд равен $I = 0.1-2$ мА, а степень ионизации составляет $\alpha \approx 10^{-2}$. Выполнены расчеты компонентного состава плазмы в молекулярном водороде с использованием поуровневого. С использованием численного моделирования были определены заселенности колебательных состояний молекулы.

3.2. Кинетические процессы в плазме газовых разрядов

Трудоемкость описания кинетики ионизации и диссоциации водорода в пеннинговском разряде объясняется большим многообразием физико-химических процессов, протекающих в плазме газового разряда, кинетической неравновесностью плазмы (энергетический спектр электронов отличается от распределения Максвелла, а распределение молекул по колебательным уровням не бoльцмановское), а также сложностью решения системы кинетических уравнений. Тем не менее по мере увеличения производительности компьютеров, а также появления новых данных по характеристикам взаимодействия элементарных частиц (сечения рассеяния и константы скорости элементарных реакций) создаются предпосылки для создания расчетно-теоретических моделей газовых разрядов, включающих все большее многообразие физико-химических процессов.

В Табл. 15 приведен список физико-химических процессов, протекающих в плазме молекулярного водорода, а также даны ссылки на работы, в которых приводятся сечения рассеяния, либо константы скорости для данного процесса. Одним из основных процессов, протекающих в плазме молекулярного водорода, является возбуждение вращательных (1) и колебательных (2-4) степеней свободы молекул. Многими авторами отмечается, что значительная доля энергии электронов в газовых разрядах тратится на возбуждение внутренних степеней

свободы молекул, при этом распределение молекул водорода в газоразрядной плазме становится не равновесным (не бoльцмановским), а процессы возбуждения электронных состояний молекулы водорода, а также ионизации и диссоциации могут идти преимущественно через возбужденные колебательные состояния молекулы. Стоит также отметить, что в отличие от плазмы молекулярного азота [97], [98], где имеет место прямое возбуждение колебательных уровней молекулы при столкновении с электроном, в плазме молекулярного водорода значительное влияние на колебательное распределение молекулы водорода оказывает ступенчатый механизм возбуждения молекулы электронным ударом. Сначала происходит переход молекулы в возбужденное электронное состояние $H_2(B^1\Sigma_u^+, v')$, либо $H_2(C^1\Pi_u, v')$ электронным ударом, затем возбужденная молекула переходит в основное электронное состояние с возбужденным колебательным уровнем $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_f)$. Учет возбуждения синглетных (10-19) и триплетных (5-9) электронных состояний молекулы H_2 необходим для правильного описания кинетики ионизации и диссоциации в плазме газовых разрядов, т. к. данные процессы в плазме молекулярного водорода проходят преимущественно за счет ступенчатых процессов. Ионизация молекулы водорода электронным ударом может протекать с образованием ионов $H_2^+(X^2\Sigma_g^+)$ и $H_2^+(X^2\Sigma_u^+)$ с различными типами симметрии молекулярного иона. Реакции №22-36 описывают различные ступенчатые механизмы диссоциации молекулы водорода, протекающие через синглетные ($B^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$, $E\Sigma_u^+$, $F^1\Sigma_u^+$, $H^1\Sigma_g^+$, $I^1\Pi_g$) и триплетные ($c^3\Pi_u$, $a^3\Sigma_g^+$, $e^3\Sigma_g^+$, $h^3\Sigma_g^+$, $j^3\Pi_g$) электронные состояния. Механизмы №37-39 описывают оптически разрешенные электронные переходы в молекуле водорода. Процессы №40-41 описывают возбуждение атома электронным ударом, а процессы №42-43 описывают ионизацию нейтрального атома из основного и возбужденного состояний. Значительный вклад в производство атомов и атомарных ионов водорода в газоразрядной плазме

вносят процессы диссоциативной ионизации молекулы водорода (процессы 44-46). Существенное влияние на кинетику плазмохимических процессов в пеннинговском разряде могут оказывать процессы конверсии ионов, а также реакции с тяжелыми частицами (молекулами и атомами), однако к настоящему моменту в литературе отсутствуют либо недостаточно данных для описания кинетики данных процессов. Константы скорости данных процессов, используемые различными авторами, часто отличаются на порядки и не зависят от энергии столкновения частиц.

Табл. 15 Механизмы плазмохимических реакций.

Возбуждение вращательных уровней молекулы электронным ударом	
1. $e + H_2(X, v, j) \rightarrow e + H_2(X, v, j+2)$	[50], [99]
Возбуждение колебательных состояний молекулы электронным ударом	
2. $e + H_2(X, v) \rightarrow e + H_2(X, v')$	[50], [99] ($ v' - v \leq 3$, $nv=14$), [47] (только $v=1$), [63], [44], [100], [101], [102], [103]–[105]
3. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+, v') + e \rightarrow H_2(X^1\Sigma_g^+, v_f) + e + hv$	[58] ($nv=14$), [101], [102], [44], [100], [44], [52] ($nv=20$), [53], [63]
4. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(C^1\Pi_u, v') + e \rightarrow H_2(X^1\Sigma_g^+, v_f) + e + hv$	[58] ($nv=14$), [101], [102], [44], [100], [44], [52] ($nv=20$), [53], [63]
Возбуждение электронных состояний молекулы электронным ударом	
5. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(b^3\Sigma_u^+) + e$	[50], [106], [107], [47]
6. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(c^3\Pi_u) + e$	[50], [106], [108], [47]
7. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(a^3\Sigma_g^+) + e$	[50], [106], [107], [47], [101], [102], [44], [100]
8. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(d^3\Pi_u) + e$	[50], [109]
9. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(e^3\Sigma_g^+) + e$	[50], [110]
10. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+) + e$	[50], [106], [111], [47], [44], [52], [63], [101], [102], [44], [100]
11. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(C^1\Pi_u) + e$	[50], [106], [111], [47], [44], [52], [101], [102], [44], [100]
12. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(E\Sigma_u^+) + e$	[50], [106], [112], [47]
13. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(F^1\Sigma_u^+) + e$	[50], [106], [112], [47]
14. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(B'^1\Sigma_u^+) + e$	[50], [111], [47], [44], [52], [101], [102], [44], [100]
15. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(D^1\Pi_u) + e$	[50], [111], [47], [44], [52], [101], [102], [44], [100]
16. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(B''^1\Sigma_u^+) + e$	[50], [112], [47], [44], [52]

17. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(D^1\Pi_u) + e$	[50], [112], [47], [44], [52], [101], [102], [44], [100]
18. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(I^1\Pi_g) + e$	[44], [52]
19. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(BU\Sigma) + e$	[101], [102], [44], [100]
Ионизация молекулы электронным ударом	
20. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2^+(X^2\Sigma_g^+) + e$	[50], [55], [44], [52], [45], [53], [66](vi=0), [44], [52], [101], [102]
21. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2^+(X^2\Sigma_u^+) + e$	[50], [55]
Диссоциация молекулы электронным ударом	
22. $H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow 2H(n=1) + e \quad b^3\Sigma_u^+, c^3\Pi_u, a^3\Sigma_g^+, d^3\Pi_u$ ($v < 5$) $e^3\Sigma_g^+$	[50]
23. $H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow H(n=1) + H(n=2) + e \quad d^3\Pi_u$	[50]
24. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow H(1s) + H(2l) + e$	[44], [52] (nv=14), [42]
25. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(C^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow H(1s) + H(2l) + e$	[44], [52] (nv=14), [42]
26. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(I^1\Pi_g) + e \rightarrow H(1s) + H(2l) + e$	[44], [52] (nv=20)
27. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow 2H + e$	[44], [52] (nv=14)
28. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(D^1\Pi_u) + e \rightarrow 2H + e$	[44], [52] (nv=14), [50]
29. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(B'^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow 2H + e$	[44], [52] (nv=14), [50]
30. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(D^1\Pi_u) + e \rightarrow 2H + e$	[44], [52] (nv=14), [50]
31. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(b^3\Sigma_u^+) + e \rightarrow H(1s) + H(1s) + e$	[44], [52] (nv=14), [55]
32. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2^*(B^1\Sigma_u^+, C^1\Pi_u) + e \rightarrow$ $\rightarrow H_2(X^1\Sigma_g^+) + e + hv \rightarrow H(1s) + H(1s) + e + hv$	[44], [52] (nv=14)
33. $H_2(X, v) + e \rightarrow H_2^*(X, v) + e \rightarrow e + H + H^* (n=2)$ $B'^1\Sigma_u^+ \quad C^1\Pi_u \quad E\Sigma_u^+ \quad F^1\Sigma_u^+ \quad H^1\Sigma_g^+$ $I^1\Pi_g, \quad c^3\Pi_u, \quad a^3\Sigma_g^+ \quad e^3\Sigma_g^+ \quad h^3\Sigma_g^+ \quad j^3\Pi_g$	[55]
34. $H_2(X, v) + e \rightarrow H_2^*(X, v) + e \rightarrow e + H + H^* (n=3)$ $^3\Pi_g, \quad ^3\Sigma_u^+, \quad J^1\Delta_g, \quad D^1\Pi_u, \quad V^1\Pi_u, \quad g^3\Sigma_u^+$	[55]
35. $H_2(X, v) + e \rightarrow H_2^*(X, v) + e \rightarrow e + H + H^* (n=4) \quad D^1\Pi_u$	[55]
36. $H_2(X, v) + e \rightarrow H_2^*(X, v) + e \rightarrow e + H + H^* (n=5) \quad D'^1\Pi_u$	[55]
Переходы между электронными состояниями молекулы	
37. $H_2(a^3\Sigma_g^+) + e \rightarrow H_2(d^3\Sigma_u^+) + e$	[58]

38. $H_2(c^3\Pi_u) + e \rightarrow H_2(g^3\Sigma_g^+) + e$	[58]
39. $H_2(c^3\Pi_u) + e \rightarrow H_2(h^3\Sigma_g^+) + e$	[58]
Возбуждение атома электронным ударом	
40. $H(1s) + e \rightarrow H(2p) + e$	[47]
41. $H(1s) + e \rightarrow H(n^*) + e$	[47] ($n^* < 4$), [50] ($n^* > 2$), [63] ($n^* = 2$)
Ионизация атома электронным ударом	
42. $H + e \rightarrow H^+ + e + e$	[47], [50], [63], [101], [102], [66]
43. $H(n > 1) + e \rightarrow H^+ + e + e$	[50]
«Диссоциативная» ионизация	
44. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(X^2\Sigma_g^+) + 2e \rightarrow H(1s) + H^+ + 2e$	[44], [52], [66]
45. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(^2\Sigma_u^+) + 2e \rightarrow H(1s) + H^+ + 2e$	[44], [52]
46. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(^2\Sigma_u^+) + e \rightarrow H(1s) + H^-(1s^2)$	[44], [52], [53], [63]
Рекомбинация + конверсия ионов	
47. $H^- + e \rightarrow H + e + e$	[50]
48. $H_2^+ + e \rightarrow H^+ + H + e$	[50], [66], [113], [114]
49. $H_3^+ + e \rightarrow H^+ + H + H + e$	[50], [113], [114]
50. $H_5^+ + e \rightarrow H_3^+ + H_2 + e$	[50], [114]
51. $H_2^+ + e \rightarrow H^+ + H^+ + e + e$	[66]
52. $H_3^+ + e \rightarrow H_2^+ + H + e$	[66]
53. $H_2^+ + e \rightarrow H^* + H$	[66]
54. $H_3^+ + e \rightarrow 3H$	[66]
55. $H_3^+ + e \rightarrow H_2 + H$	[66]
56. $H_3^+ + e \rightarrow 3H$ or $H_2(v > 5) + H^*(n = 2)$	[63]
Реакции молекул и атомов	
57. $H_2(X, v) + H_2(X, w+1) \rightarrow H_2(X, v+1) + H_2(X, w)$	[50], [101], [102]
58. $H(n=2) + H_2(X^1\Sigma_g^+, v) \rightarrow H(n=1) + H_2(b^3\Sigma_u^+) \rightarrow 3H(n=1)$	[50], [115]
59. $H + H + H_2 \leftrightarrow H_2(X, v=14) + H_2$	[50]
60. $H + H + H \leftrightarrow H_2(X, v=14) + H$	[50]
61. $H(n) \rightarrow H(n') + h\nu$	[50]
62. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v, j) + H = H + H + H$	[42], [101], [102] ($j=0$), [116, с. 2]
63. $H + H_2(X, v=0) \rightarrow H + H_2(X, v=1)$	[53]
64. $H_2^+ + H_2 \rightarrow H_3^+ + H$	[53]
65. $H^- + H_3^+ \rightarrow \text{neutrals}$	[53]
67. $H^- + H \rightarrow H_2 + e$	[53]
68. $H_2^+ + H \rightarrow H_2 + H^+$	[66]

69. $H_2(v) + H^+ \rightarrow H_2^+ + H$ (p-CX)	[66] (v=0), [101], [102]
70. $H_2^+ + H_2 \rightarrow H_3^+ + H$	[66]
71. $H_2(v) + H^+ \rightarrow H_2(w) + H^+$ (pV)	[101], [102], [117], [118]
72. $H_2(v) + H^+ \rightarrow H^+ + H + H$ (pV-diss)	[101], [102], [116, с. 2]
73. $H_2(v) + H \rightarrow H_2(w) + H$ (Vt)	[101], [102], [116, с. 2]
74. $H_2(14) + H_2(w) \rightarrow H + H + H_2(w)$ (VT-diss)	[101], [102]
Реакции на поверхности катода	
75. $H_2^+ + wall \rightarrow H_2(w)$ (sV ₂)	[101], [102], [66] (wall)
76. $H + Cu \rightarrow H_{ad} + Cu$ $H + H_{ad} + Cu \rightarrow H_2(w) + Cu$ (AV)	[101], [102], [66] (wall)

3.3. Численное моделирование компонентного состава плазмы пеннинговского разряда

С использованием данных из работ, обзор которых приведен выше, была разработана база данных поуровневых сечений рассеяния и констант скоростей [119], [120] (см. Табл. 15) следующих процессов, определяющих компонентный состав плазмы пеннинговского разряда:

1. $e + H_2(X, v) \rightarrow e + H_2(X, v')$
2. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+, C^1\Pi_u, v') + e \rightarrow H_2(X^1\Sigma_g^+, v_f) + e + hv$
3. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(X^2\Sigma_g^+) + e$
4. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(X^2\Sigma_g^+) + 2e \rightarrow H(1s) + H^+ + 2e$
5. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(^2\Sigma_u^+) + 2e \rightarrow H(1s) + H^+ + 2e$
6. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow H(1s) + H(2l) + e$
7. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(C^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow H(1s) + H(2l) + e$
8. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow 2H + e$
9. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(D^1\Pi_u) + e \rightarrow 2H + e$
10. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(B''^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow 2H + e$
11. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(D^1\Pi_u) + e \rightarrow 2H + e$

12. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(b^3\Sigma_u^+) + e \rightarrow H(1s) + H(1s) + e$
13. $H + e \rightarrow H^+ + e + e$
14. $H_2(X, w) + H_2(X, v) \leftrightarrow H_2(X, w-1) + H_2(X, v+1)$
15. $H_2(X, w) + H_2 \leftrightarrow H_2(X, w-1) + H_2$
16. $H_2^+ + H \rightarrow H_2 + H^+$
17. $H^+ + H_2(v \geq 4) \rightarrow H + H_2^+$
18. $H + H + H_2 \rightarrow H_2(X, v=14) + H_2$
19. $H + H + H \rightarrow H_2(X, v=14) + H$
20. $e + e + H^+ \rightarrow e + H(n)$
21. $e + H^+ \rightarrow H + h\nu$
22. $e + e + H_2^+ \rightarrow e + 2H$
23. $e + H_2^+ \rightarrow H(l) + H(n)$

Первая реакция описывает прямое колебательное возбуждение молекулы водорода электронным ударом. Набор сечений для этой реакции, так же как и для реакций ионизации электронным ударом был взят из работы [76]. Реакция №2 описывает колебательное возбуждение молекулы через возбуждение синглетных электронных уровней $B^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$, реакция №3 описывает ионизацию молекулы электронным ударом из различных колебательно-возбужденных состояний основного электронного состояния, механизмы № 4-5 описывают процессы диссоциативной ионизации, протекающих через состояния $H_2^+(X^2\Sigma_g^+)$ и $H_2^+(^2\Sigma_u^+)$, реакции № 6-12 описывают ступенчатый механизм диссоциации молекулы электронным ударом через возбужденные синглетные ($B^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$, $B'^1\Sigma_u^+$, $D^1\Pi_u$, $B''^1\Sigma_u^+$, $D'^1\Pi_u$) и триплетные состояния ($b^3\Sigma_u^+$). Сечения рассеяния процессов № 3-12 были взяты из работы [105]. Основные параметры кинетической схемы и констант скоростей, используемых в работе, даны в Табл. 16. Большинство сечений рассеяния электронов на молекулах и атомах водорода известны в диапазоне энергий $0 \leq \varepsilon \leq 200$ eV . Поэтому в

области высоких энергий (до $\varepsilon \leq 1500$ eV) сечения рассеяния аппроксимировались зависимостью $\sigma(\varepsilon) \sim \frac{\ln(\varepsilon)}{\varepsilon}$.

Константы скорости процессов рекомбинации рассчитывались на основе принципа детального равновесия. Константы скорости реакций №15 и №16 (VV и VT-переходы) рассчитывались с использованием методики, описанной в разделе VI. Константа скорости реакции №17 взята из работы[104]:

$$k_{17} = 9 \times 10^{-16} \frac{m^3}{s}$$

Константы скорости процессов 1-13 рассчитывались как свертка функции распределения электронов по энергиям с соответствующим сечением рассеяния.

Табл. 16 Поуровневая кинетическая модель для расчета атомно-молекулярного состава плазмы пеннинговского разряда.

Колебательное возбуждение		
1. $e + H_2(X, v) \rightarrow e + H_2(X, v')$	$v_i = 0-3, v' = 1-4$	$v' = 1 \ 0 \leq \varepsilon \leq 1000$ eV $v' = 2 \ 0 \leq \varepsilon \leq 12$ eV $v' = 3 \ 0 \leq \varepsilon \leq 14$ eV
2. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+, C^1\Pi_u, v') + e \rightarrow$ $\rightarrow H_2(X^1\Sigma_g^+, v_f) + e + h\nu$	$v_i = 0-14, v_f = 0-14$	$0 \leq \varepsilon \leq 200$ eV
3. $H_2(X, w) + H_2(X, v) \leftrightarrow H_2(X, w-1) + H_2(X, v+1)$	$v = 0-14, w = 0-14$	-
4. $H_2(X, w) + H_2 \leftrightarrow H_2(X, w-1) + H_2$	$w = 0-14$	-
Ионизация молекулы		
5. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2^+(X^2\Sigma_g^+) + e$	$v_i = 0-14$	$0 \leq \varepsilon \leq 200$ eV
Диссоциативная ионизация		
6. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2^+(X^2\Sigma_g^+) + 2e \rightarrow H(1s) + H^+ + 2e$	$v_i = 0-14$	$0 \leq \varepsilon \leq 200$ eV
7. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2^+(^2\Sigma_u^+) + 2e \rightarrow H(1s) + H^+ + 2e$	$v_i = 0-14$	$0 \leq \varepsilon \leq 200$ eV
Диссоциация		

8. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow H(1s) + H(2l) + e$	$\nu_i = 0-14$	$0 \leq \varepsilon \leq 200 \text{ eV}$
9. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(C^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow H(1s) + H(2l) + e$	$\nu_i = 0-14$	$0 \leq \varepsilon \leq 200 \text{ eV}$
10. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(B'^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow 2H + e$	$\nu_i = 0-14$	$0 \leq \varepsilon \leq 200 \text{ eV}$
11. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(D^1\Pi_u) + e \rightarrow 2H + e$	$\nu_i = 0-14$	$0 \leq \varepsilon \leq 200 \text{ eV}$
12. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(B''^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow 2H + e$	$\nu_i = 0-14$	$0 \leq \varepsilon \leq 200 \text{ eV}$
13. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(D'^1\Pi_u) + e \rightarrow 2H + e$	$\nu_i = 0-14$	$0 \leq \varepsilon \leq 200 \text{ eV}$
14. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(b^3\Sigma_u^+) + e \rightarrow H(1s) + H(1s) + e$	$\nu_i = 0-14$	$0 \leq \varepsilon \leq 200 \text{ eV}$
Ионизация атома		
15. $H + e \rightarrow H^+ + e + e$	CS(Janev R. K., Langer W.D., Evans, K.J., Post D.E., Elementary Processes in Hydrogen-Helium Plasmas, 1987)	$0 \leq \varepsilon \leq 1000 \text{ eV}$
Процессы с участием тяжелых частиц		
16. $H_2^+ + H \rightarrow H_2 + H^+$	$K = 9.D-16 \text{ cm}^6\text{s}^{-1}$ [121]	
17. $H + H_2(\nu \geq 4) \rightarrow H + H_2^+$	$K = 2.5D-15 \text{ cm}^6\text{s}^{-1}$ [121]	
18. $H + H + H_2 \rightarrow H_2(X, \nu = 14) + H_2$	$K = 2.68 * 10^{-31} * T^{-0.6} \text{ cm}^6\text{s}^{-1}$ [50]	
19. $H + H + H \rightarrow H_2(X, \nu = 14) + H$	$K = 8.04 * 10^{-31} * T^{-0.6} \text{ cm}^6\text{s}^{-1}$ [50]	
Рекомбинация		
20. $e + e + H^+ \rightarrow e + H(n)$	$K = 6.34 * 10^{-27} n^2 \times \frac{1}{T_e^3 (E_n^{2.33} + 4.38 E_n^{1.72} + 1.32 E_n)}, \text{ cm}^6\text{s}^{-1}$ [122]	
21. $e + H^+ \rightarrow H + h\nu$	$K = 3.92 * 10^{-14} \frac{1}{n} \times \frac{E_n^{1.5}}{E_n + 0.35}, \text{ cm}^3\text{s}^{-1}$ [122]	
22. $e + e + H_2^+ \rightarrow e + 2H$	$K = 8.75 * 10^{-27} T_e^{-4.5} \text{ cm}^6\text{s}^{-1}$ [50]	
23. $e + H_2^+ \rightarrow H(l) + H(n)$	CS [46]	

Расчет компонентного состава плазмы пеннинговского разряда в нульмерном приближении проводился при следующих предположениях :

- 1) В качестве начальных данных задавались концентрация электронов, соответствующая расчетам и оценкам [123], а также концентрация нейтральных молекул водорода. Концентрация электронов в расчетах считалась постоянной.
- 2) Функция распределения электронов по энергиям считалась либо максвелловской, либо комбинацией максвелловской ФРЭ (моделирующей тепловые электроны, рождающиеся в основном объеме разряда) и дельта-функции (описывает быстрые электроны, вылетающие с катода, в результате ион-электронной эмиссии). При этом считалось, что доля быстрых электронов составляет 10%.
- 3) Энергия тепловых электронов варьировалась в диапазоне 1-50 эВ, энергия быстрых электронов считалась равной 1кэВ, температура нейтральных молекул и ионов считалась равной 300-500 К.
- 4) Физическое время считалось равным 20 мкс. Оно соответствует длительности импульса в источнике ионов на основе пеннинговского разряда.

На Рис. 14 и Рис. 15 показаны численные результаты по степени диссоциации, степени ионизации, а также соотношению молекулярных и атомарных ионов водорода в плазме пеннинговского разряда в зависимости от температуры электронов. Результаты приведены для двух различных начальных концентраций электронов ($N_e^0 = 3 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}$ и $N_e^0 = 3 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3}$), а также различных функций распределения электронов по энергии. На рис. 14 видно, что для случая

$N_e^0 = 3 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}$ доля молекулярных ионов $\frac{H_2^+}{H_2}$ меняется от $\frac{[H_2^+]}{[H_2]} = 1.3 \times 10^{-5}$ при

$T_e = 3 \text{ эВ}$, до $\frac{[H_2^+]}{[H_2]} = 7.6 \times 10^{-3}$ при $T_e = 50 \text{ эВ}$. Относительная концентрация

атомарных ионов $\frac{H^+}{H_2}$ меняется от $\frac{[H^+]}{[H_2]} = 1.8 \times 10^{-7}$ при $T_e = 3$ эВ, до

$$\frac{[H^+]}{[H_2]} = 1.8 \times 10^{-3} \text{ при } T_e = 50 \text{ эВ.}$$

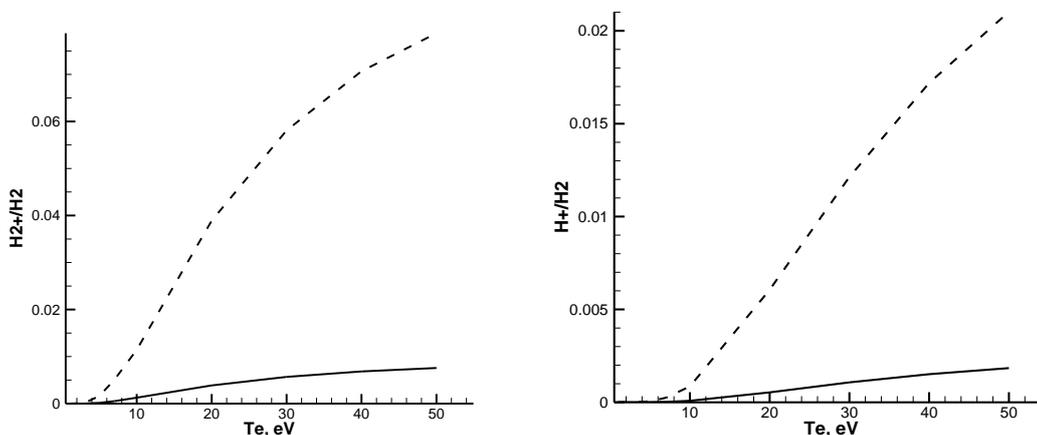


Рис. 14 Зависимость степени ионизации (относительная доля молекулярных и атомарных ионов) плазмы пеннинговского разряда от температуры электронов в случае максвелловской функции распределения: пунктирная линия - $N_e^0 = 3 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3}$, сплошная линия - $N_e^0 = 3 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}$

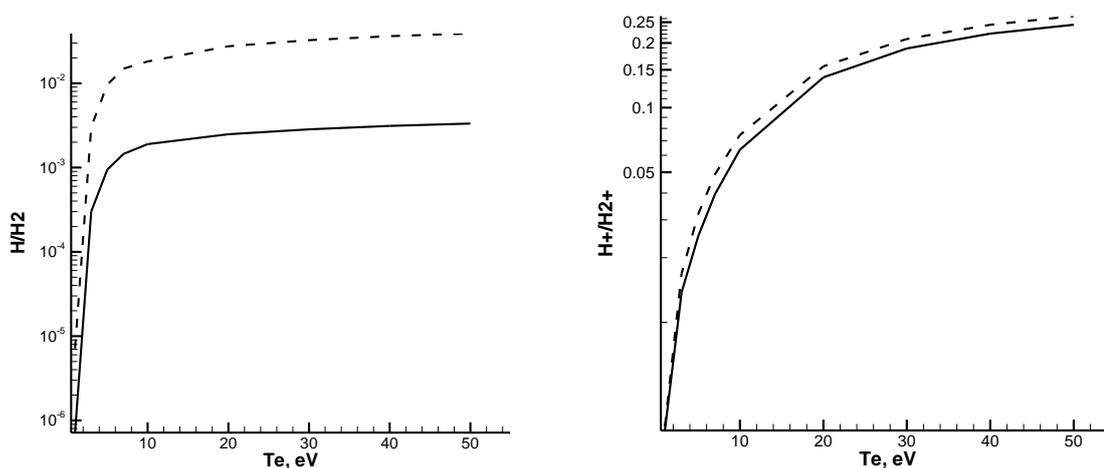


Рис. 15 Зависимость степени диссоциации, а также соотношения атомарных и молекулярных ионов в плазме пеннинговского разряда от температуры электронов в случае максвелловской функции распределения: пунктирная линия - $N_e^0 = 3 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3}$, сплошная линия - $N_e^0 = 3 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}$

Степень диссоциации варьируется от $\frac{[H]}{[H_2]} = 3 \times 10^{-3}$ при $T_e = 3$ эВ , до

$\frac{[H]}{[H_2]} = 3.9 \times 10^{-2}$ при $T_e = 50$ эВ . При увеличении концентрации электронов до

величины $N_e^0 = 3 \times 10^{17} \text{ м}^{-3}$ степени ионизации и диссоциации увеличиваются на порядок. При этом соотношение атомарных и молекулярных ионов в плазме пеннинговского разряда изменяется незначительно при изменении

концентрации электронов (см. Рис. 15). Оно меняется от $\frac{[H^+]}{[H_2^+]} = 1.38 \times 10^{-2}$ при

$T_e = 3$ эВ, до $\frac{[H^+]}{[H_2^+]} = 0.24$ при $T_e = 50$ эВ.

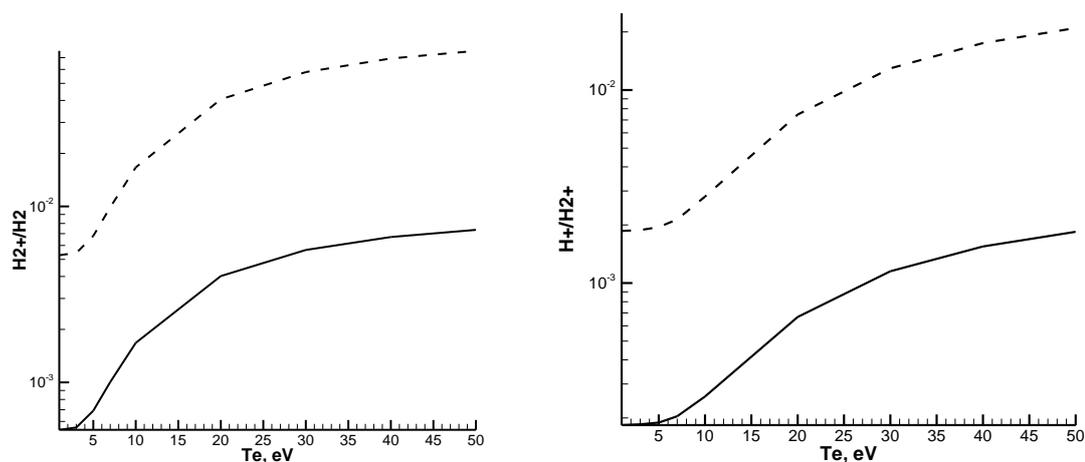


Рис. 16 Зависимость степени ионизации (относительная доля молекулярных и атомарных ионов) плазмы пеннинговского разряда от температуры электронов в случае немаксвелловской функции распределения: пунктирная линия - $N_e^0 = 3 \times 10^{17} \text{ м}^{-3}$, сплошная линия - $N_e^0 = 3 \times 10^{16} \text{ м}^{-3}$

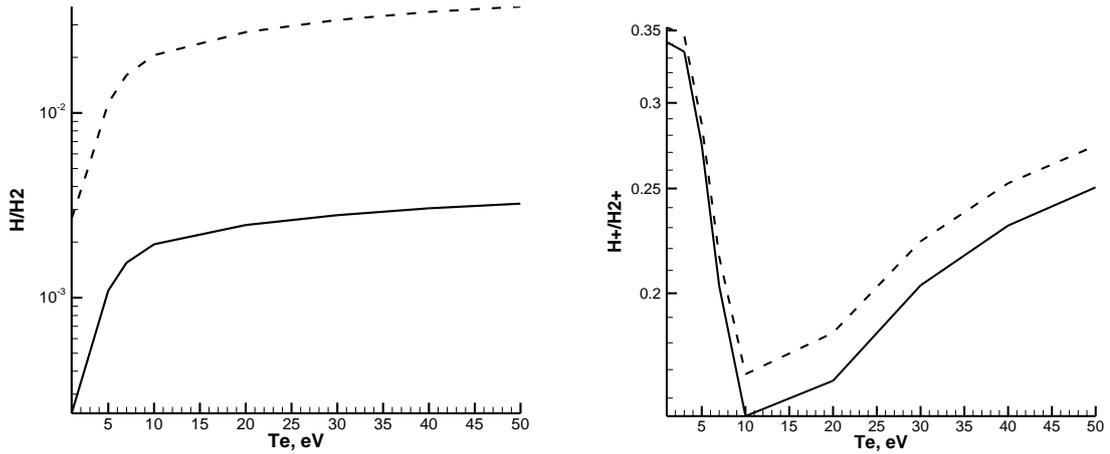


Рис. 17 Зависимость степени диссоциации, а также соотношения атомарных и молекулярных ионов в плазме пеннинговского разряда от температуры электронов в случае немаксвелловской функции распределения: пунктирная линия - $N_e^0 = 3 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3}$, сплошная линия - $N_e^0 = 3 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}$

Вторая серия расчетов проводилась для случая, когда функция распределения электронов является комбинацией максвелловской ФРЭ (моделирующей тепловые электроны, рождающиеся в основном объеме разряда) и дельта-функции (описывает быстрые электроны, вылетающие с катода, в результате ион-электронной эмиссии). Считалось, что доля моноэнергетических электронов составляет 10% от тепловых электронов, а их энергия равна 1кэВ. Температура максвелловских (тепловых электронов) также, как и в предыдущем случае варьировалась в диапазоне 1-50 эВ. Результаты численного моделирования приведены на Рис. 16 и Рис. 17. На Рис. 16 видно, что для случая

$N_e^0 = 3 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}$ доля молекулярных ионов $\frac{H_2^+}{H_2}$ меняется от $\frac{[H_2^+]}{[H_2]} = 5.5 \times 10^{-4}$ при

$T_e = 3 \text{ эВ}$, до $\frac{[H_2^+]}{[H_2]} = 7.4 \times 10^{-3}$ при $T_e = 50 \text{ эВ}$. Относительная концентрация

атомарных ионов $\frac{H^+}{H_2}$ меняется от $\frac{[H^+]}{[H_2]} = 1.8 \times 10^{-4}$ при $T_e = 3 \text{ эВ}$, до

$\frac{[H^+]}{[H_2]} = 1.8 \times 10^{-3}$ при $T_e = 50$ эВ . Степень диссоциации варьируется от

$\frac{[H]}{[H_2]} = 5 \times 10^{-4}$ при $T_e = 3$ эВ , до $\frac{[H]}{[H_2]} = 3 \times 10^{-3}$ при $T_e = 50$ эВ . Таким образом

учет влияния моноэнергетических электронов на кинетику плазмохимических процессов в плазме пеннинговского разряда приводит к росту концентрации молекулярных ионов водорода, а также значительному увеличению концентрации атомарных ионов водорода в плазме. Поэтому доля атомарных ионов водорода при низких температурах электронов сильно увеличивается (см. Рис. 17). При увеличении температуры электронов значительно увеличивается концентрация молекулярных ионов, в тоже время концентрация атомарных ионов водорода растет не так быстро, поэтому соотношение атомарных и молекулярных ионов уменьшается, достигая величины $\approx 10\%$ при $T_e \approx 10$ эВ . При дальнейшем увеличении температуры электронов до $T_e = 50$ эВ оказывается, что концентрации атомарных ионов водорода растут быстрее, чем концентрации молекулярных, поэтому величина $\frac{[H^+]}{[H_2^+]}$ снова растет.

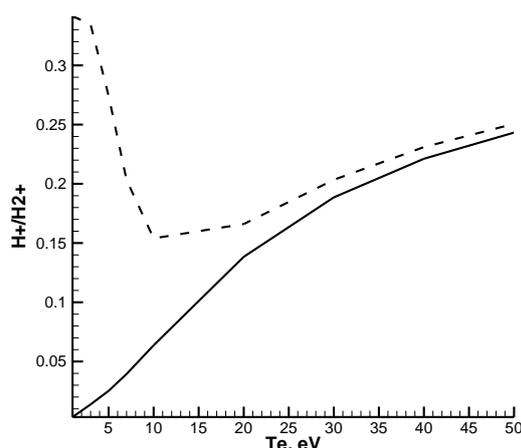


Рис. 18 Зависимость соотношения атомарных и молекулярных ионов в плазме пеннинговского разряда от температуры электронов в случае: пунктирная линия – немаксвелловская ФРЭ-, сплошная линия - максвелловская ФРЭ.

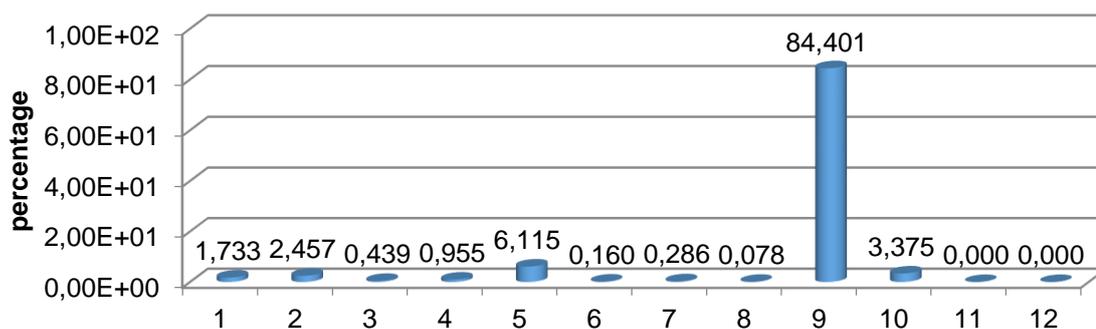


Рис. 19 Доля нейтральных атомов H образовавшихся за счет различных механизмов (ФРЭЭ максвелловская, $T_e = 10$ эВ, $N_e^0 = 3 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3}$).

1. $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2^+(X^2\Sigma_g^+) + 2e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}^+ + 2e$
2. $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2^+(^2\Sigma_u^+) + 2e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}^+ + 2e$
3. $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(B^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}(2l) + e$
4. $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(C^1\Pi_u^+) + e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}(2l) + e$
5. $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(B'^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow 2\text{H} + e$
6. $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(D^1\Pi_u) + e \rightarrow 2\text{H} + e$
7. $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(B''^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow 2\text{H} + e$
8. $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(D'^1\Pi_u) + e \rightarrow 2\text{H} + e$
9. $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(b^3\Sigma_u^+) + e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}(1s) + e$
10. $e + \text{H}_2^+ \rightarrow \text{H}(l) + \text{H}(n)$
11. $e + e + \text{H}^+ \rightarrow e + \text{H}(n)$
12. $e + \text{H}^+ \rightarrow \text{H} + h\nu$

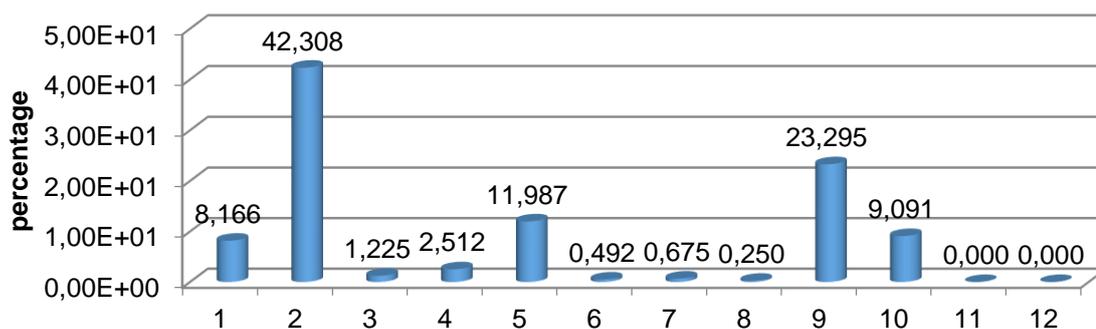


Рис. 20 Доля нейтральных атомов H образовавшихся за счет различных механизмов (ФРЭЭ максвелловская, $T_e = 50$ эВ, $N_e^0 = 3 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3}$). Список реакций приведен в подписи к Рис. 19.

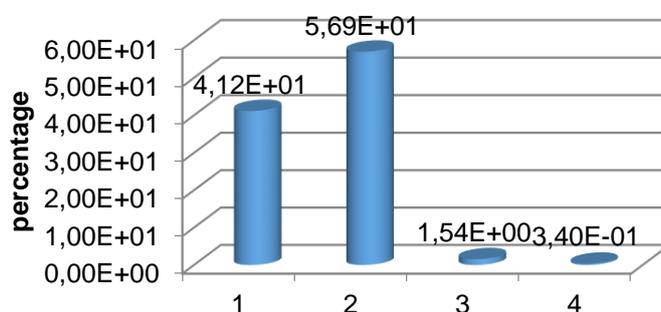


Рис. 21 Доля атомарных ионов, образовавшихся за счет реакций (ФРЭЭ максвелловская, $T_e = 10$ эВ, $N_e^0 = 3 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}$):

1. $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2^+(X^2\Sigma_g^+) + 2e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}^+ + 2e$
2. $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2^+(^2\Sigma_u^+) + 2e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}^+ + 2e$
3. $\text{H} + e \rightarrow \text{H}^+ + e + e$
4. $\text{H}_2^+ + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{H}^+$

Подробный анализ механизмов ионизации и диссоциации водорода в плазме пеннинговского разряда дан на Рис. 19 - Рис. 24. На столбчатой диаграмме Рис. 21 показано влияние различных механизмов образования атомарных ионов водорода в плазме для следующих параметров: ФРЭЭ максвелловская, $T_e = 3, 10, 50$ эВ, $N_e^0 = 3 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}$. На рисунке видно, что основными механизмами образования атомарных ионов водорода являются реакции диссоциативной

ионизации молекулы №4-5. При этом при увеличении температуры электронов влияние механизма №4 на концентрацию атомарных ионов уменьшается, а доля механизма №5 увеличивается. Стоит также отметить, что доля процесса ионизации нейтрального атома электронным ударом в образовании атомарных ионов составляет менее 3%. Тем не менее, в расчетах с $N_e^0 = 3 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3}$ доля этого механизма возрастает до 10-15%. На Рис. 19 - Рис. 20 показано влияние различных процессов на концентрацию нейтральных атомов водорода в плазме пеннинговского разряда. При низких температурах электронов основным механизмом диссоциации молекулы является реакция № 12, протекающая с возбуждением электронного состояния молекулы водорода $b^3\Sigma_u^+$. При увеличении температуры электронов, оказывается, что существенное влияние на концентрацию атомов водорода оказывают также реакции диссоциативной ионизации молекулы №4 и №5, а также ступенчатый механизм диссоциации №8, протекающий с возбуждением электронного состояния $B'^1\Sigma_u^+$ (см Рис. 20).

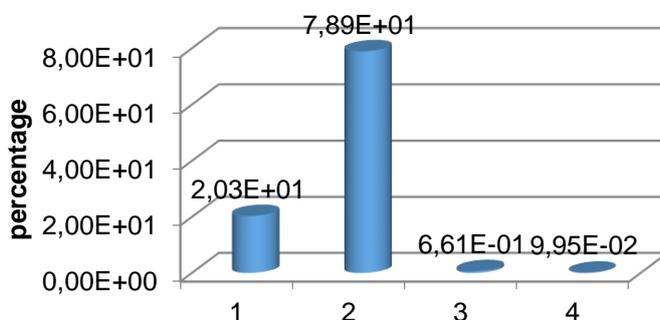
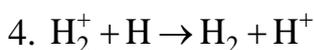
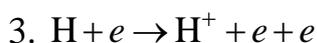
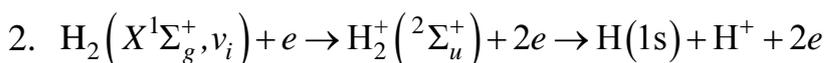
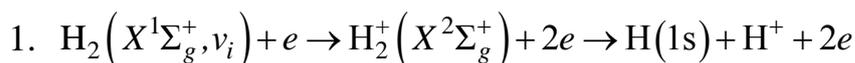


Рис. 22 Доля атомарных ионов, образовавшихся за счет реакций (ФРЭЭ немаксвелловская, $T_e = 10 \text{ эВ}$, $N_e^0 = 3 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}$):



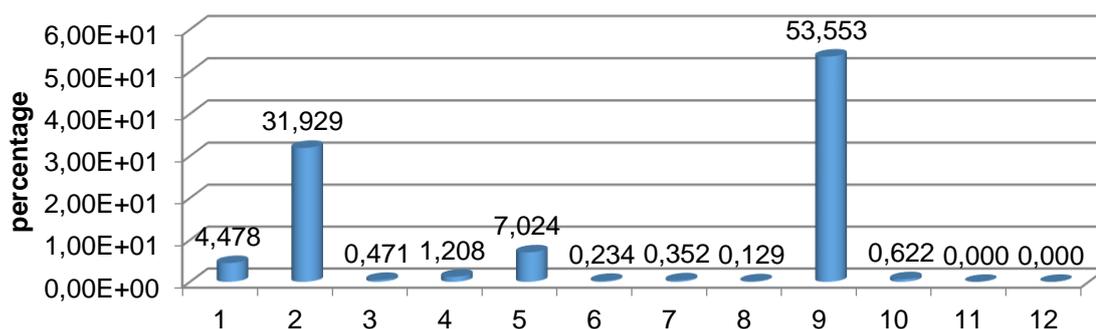


Рис. 23 Доля нейтральных атомов Н образовавшихся в реакциях (ФРЭЭ немаквелловская, $T_e = 3$ эВ, $N_e^0 = 3 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}$)

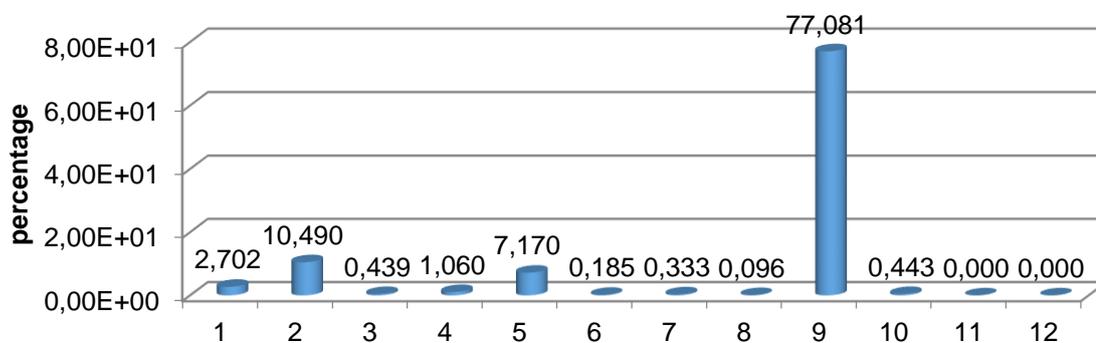


Рис. 24 Доля нейтральных атомов Н образовавшихся за счет различных механизмов (ФРЭЭ немаквелловская, $T_e = 10$ эВ, $N_e^0 = 3 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}$). Список реакций приведен в подписи к Рис. 19.

Подробный анализ механизмов ионизации и диссоциации водорода в случае немаквелловской ФРЭ, используемой в расчетах дан на Рис. 22 - Рис. 24. На столбовой диаграмме Рис. 22 показано влияние различных механизмов образования атомарных ионов водорода в плазме для следующих параметров: ФРЭЭ максвелловская, $T_e = 3, 10, 50$ эВ, $N_e^0 = 3 \cdot 10^{16}, 3 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3}$. На данных рисунках видно, что учет наличия горячих моноэнергетических электронов приводит к усилению влияния механизма диссоциативной ионизации №5 на концентрацию атомарных ионов. Численное моделирование показывает, что в этом случае доля атомарных ионов водорода, образовавшихся за счет механизма № 5 в кинетической схеме, составляет 75-85% (см. Рис. 22). На Рис. 23 - Рис. 24

показано влияние различных механизмов на концентрацию атомов водорода. В данном случае, как и в расчетах с максвелловской ФРЭЭ, оказалось, что основными механизмами диссоциации являются ступенчатые механизмы диссоциации №8 и №12, а также реакции диссоциативной ионизации №4-5.

Стоит заметить, что колебательная функция распределения молекул водорода в отличие от тлеющего разряда не оказывает существенного влияния на кинетику плазмохимических процессов в пеннинговском разряде. Большинство химических процессов (ионизация, диссоциация, возбуждение электронных состояний) протекает с участием молекул водорода в основном колебательном состоянии. Однако при увеличении температуры электронов, а также их концентрации, число колебательно-возбужденных молекул, а, следовательно, и их влияние на кинетику плазмохимических реакций возрастает. Тем не менее, во всех, проведенных в данной главе расчетах, относительная доля нейтральных атомов и атомных ионов, образовавшихся в реакциях с колебательно-возбужденными молекулами, составляет менее 10%.

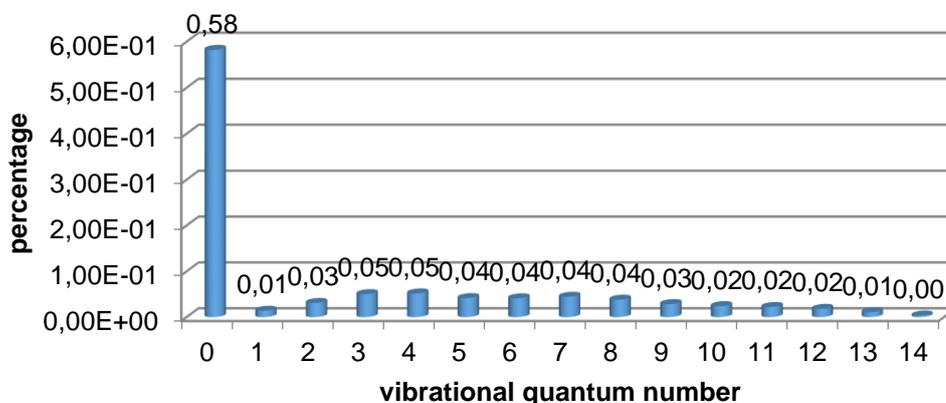


Рис. 25 Доля атомарных ионов H образовавшихся из разных колебательных состояний в реакции $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow H(1s) + H(2l) + e$.

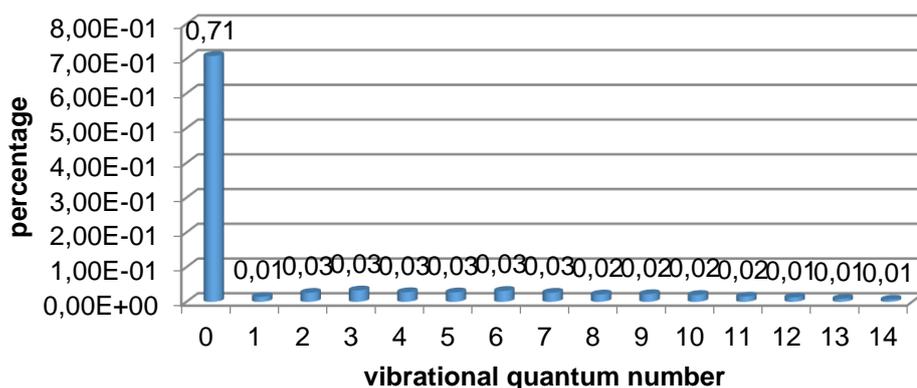


Рис. 26 Доля атомарных ионов Н образовавшихся из разных колебательных состояний в реакции $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(C^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}(2l) + e$.

Стоит также отметить, что для некоторых механизмов диссоциации, приведенных в кинетической схеме, реакции, протекающие с участием колебательно-возбужденных молекул составляют ~40% (см. Рис. 25), однако данные реакции не оказывают существенного влияния на концентрацию атомов водорода (т.к. основным поставщиком нейтральных атомов являются реакции №4, №5, №8, №12). На Рис. 25 - Рис. 26 показано влияние колебательно-возбужденных молекул на производство нейтральных атомов в реакциях №6 и №7. Доля атомов, образовавшихся в этих реакциях с участием колебательно-возбужденных молекул составляет более 30%. Тем не менее, эти механизмы не вносят существенный вклад в производство атомарных ионов в плазме пеннинговского разряда. На Рис. 27 дана колебательная функция распределения в плазме пеннинговского разряда.

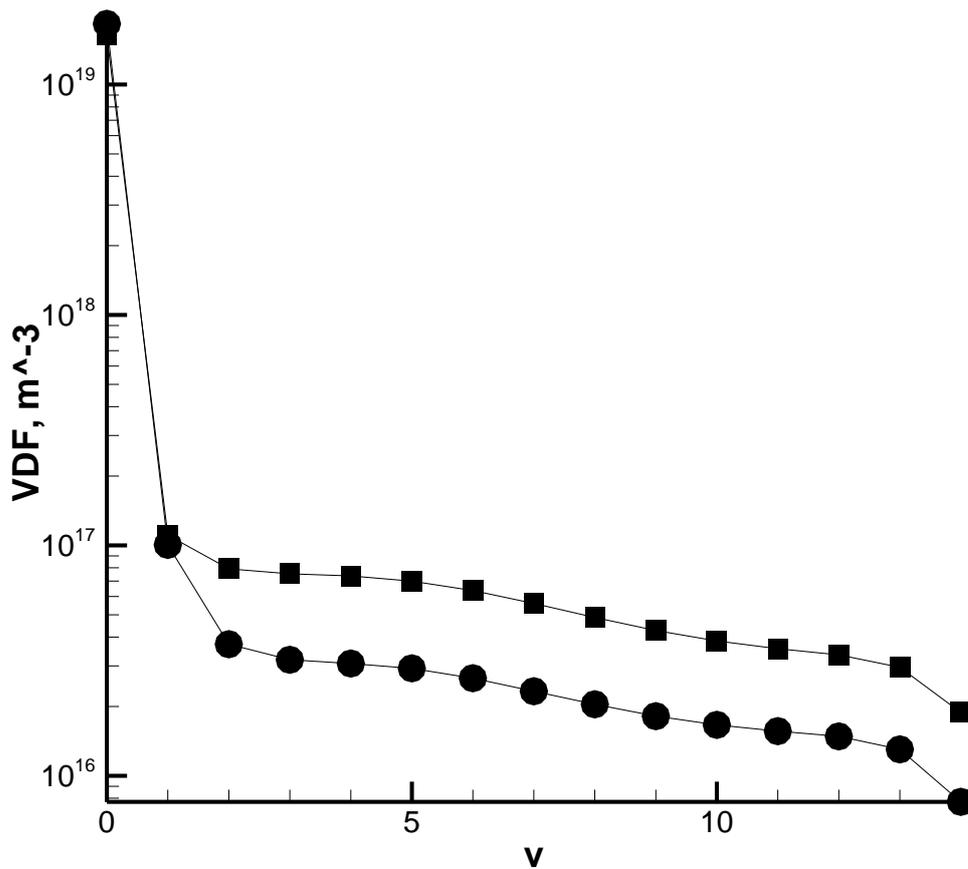


Рис. 27 Колебательная функция распределения молекул водорода (ФРЭЭ максвелловская, $N_e^0 = 3 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3}$) для различных температур электронов: $T_e = 50 \text{ эВ}$.(квадратные точки), $T_e = 10 \text{ эВ}$.(круглые точки)

Табл. 17 Влияние ионизации молекулярными ионами на концентрацию ионов H_2^+

E, eV	H2+ (II)	H2+ (WII)	DELTA(%)
200	1,37E+18	1,46E+18	5,63
150	1,43E+18	1,51E+18	5,62
100	1,45E+18	1,53E+18	5,50
50	1,27E+18	1,35E+18	5,79
20	6,47E+17	7,08E+17	8,55

Табл. 18 Влияние ионизации молекулярными ионами на концентрацию ионов H^+

E, eV	H+ (II)	H+ (WII)	DELTA(%)
200	5,80E+17	5,01E+17	15,78
150	5,91E+17	5,09E+17	16,09
100	5,71E+17	4,88E+17	16,99
50	4,37E+17	3,60E+17	21,52
20	1,72E+17	1,10E+17	55,68

Табл. 19 Влияние ионизации молекулярными ионами на концентрацию атомов H.

, eV	H (II)	H (WII)	DELTA(%)
200	7,66E+17	6,90E+17	10,98
150	7,97E+17	7,19E+17	10,91
100	8,08E+17	7,29E+17	10,87
50	7,40E+17	6,66E+17	11,16
20	5,59E+17	5,00E+17	11,87

В условиях, когда молекулярные ионы водорода успевают достичь достаточно высоких энергий (более 100 eV), существенное влияние на плазмохимический состав в пеннинговском разряде может оказывать реакция $H_2^+ + H_2 \rightarrow H^+ + H + H_2$. В Табл. 17 - Табл. 19 показано влияние этого механизма на компонентный состав плазмы для различных энергий электронов при $T_i=100$ eV.

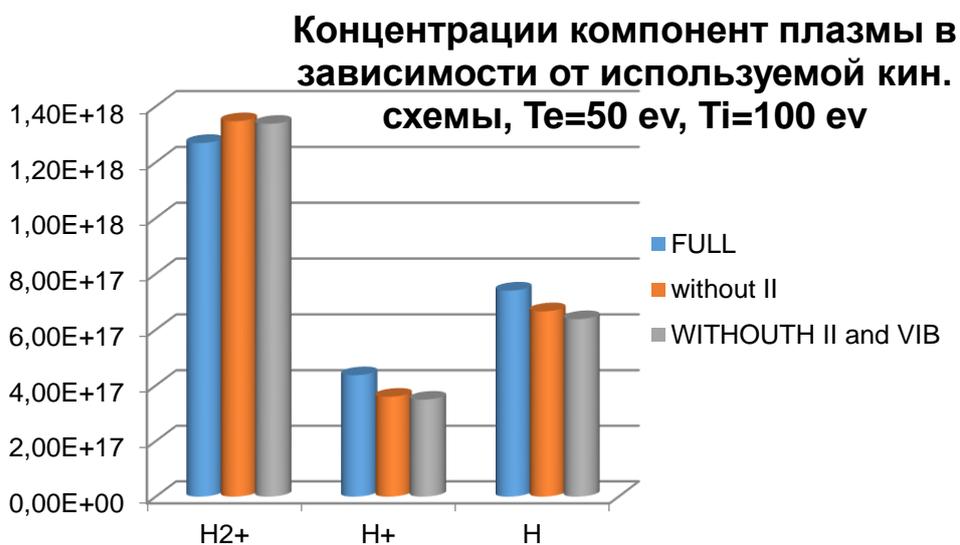


Рис. 28 Концентрации компонент плазмы в зависимости от используемой кин. схемы, $T_e=50\text{ ev}$, $T_i=100\text{ ev}$.



Рис. 29 Изменение концентрации в зависимости от используемой кин. схемы, %, $T_e=50\text{ ev}$, $T_i=100$.

Из таблиц видно, что наибольшее влияние данный механизм оказывает на концентрацию частиц H^+ . Расхождение при расчетах с учетом и без учета данного механизма достигают 55%. (при невысоких энергиях электронов).

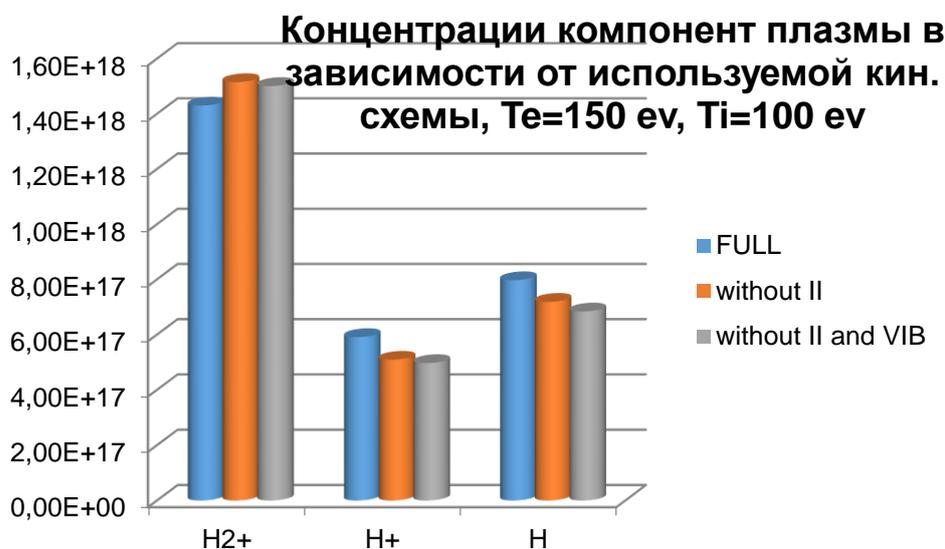


Рис. 30 Концентрации компонент плазмы в зависимости от используемой кин. схемы, $T_e=150$ ev, $T_i=100$ ev.



Рис. 31 Изменение концентрации в зависимости от используемой кин. схемы, %, $T_e=150$ ev, $T_i=100$ ev.

На Рис. 28 - Рис. 31 показано, какие расхождения в расчетах компонентного состава плазмы дает использование различных кинетических схем. В результате численных экспериментов выяснилось, что учет наличия колебательной структуры молекулы водорода приводит к незначительному росту концентрации атомарных и молекулярных ионов, степени диссоциации плазмы (см. Рис. 29, Рис. 31). В то же время реакция $H_2^+ + H_2 \rightarrow H^+ + H + H_2$ приводит к изменениям

в концентрации основных компонент плазмы на 14% и более. Поэтому в случае высоких энергий ионов в плазме этот механизм, по-видимому, также нужно учитывать при расчете компонентного состава водородной плазмы. Сечение данного процесса приведено на Рис. 32. На основе проделанных в данной главе расчетов была выбрана упрощенная кинетическая схема, позволяющая рассчитывать компонентный состав плазмы с точностью ~10% относительно более подробной поуровневой кинетической модели. Кинетическая схема включает 5 компонент H_2^+ , H_2 , H^+ , H , e и 20 реакций, которые приведены в Табл. 20.

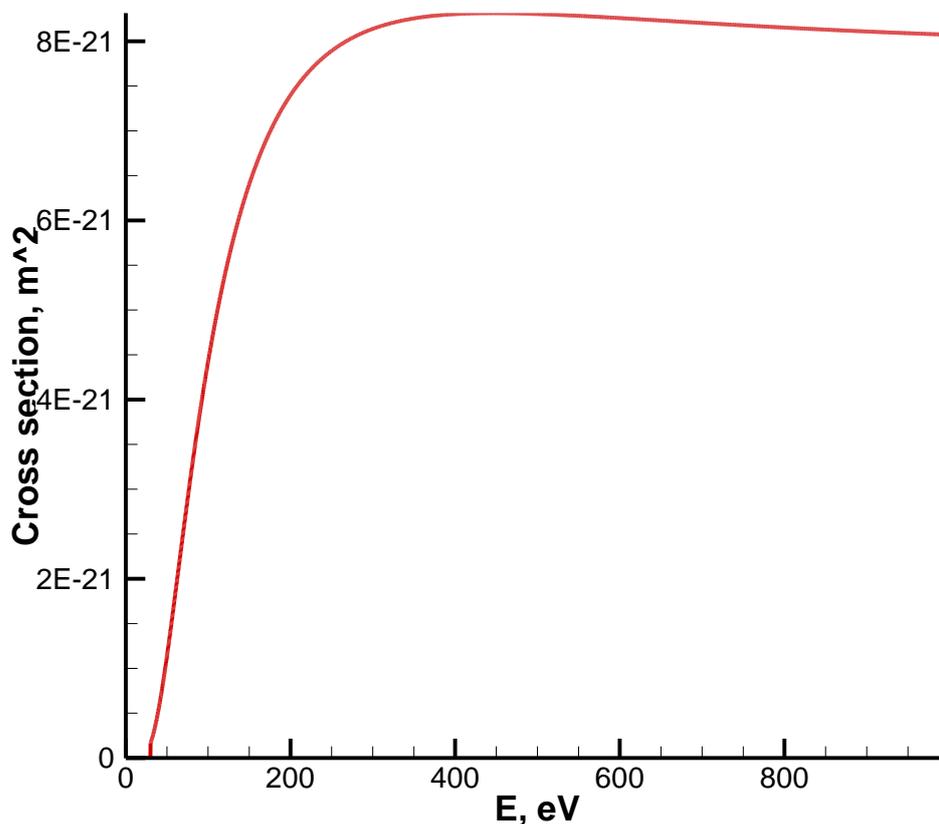


Рис. 32 Сечение процесса $H_2^+ + H_2 \rightarrow H^+ + H + H_2$.

Табл. 20 Упрощенная кинетическая модель.

Колебательное возбуждение		
Ионизация молекулы		
1. $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow \text{H}_2^+(X^2\Sigma_g^+) + e$	$\nu_i = 0$	$0 \leq \varepsilon \leq 200 \text{ eV}$
Диссоциативная ионизация		
2. $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow$ $\rightarrow \text{H}_2^+(X^2\Sigma_g^+) + 2e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}^+ + 2e$	$\nu_i = 0$	$0 \leq \varepsilon \leq 200 \text{ eV}$
3. $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow$ $\rightarrow \text{H}_2^+(^2\Sigma_u^+) + 2e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}^+ + 2e$	$\nu_i = 0$	$0 \leq \varepsilon \leq 200 \text{ eV}$
Диссоциация		
4. $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow$ $\rightarrow \text{H}_2(B^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}(2l) + e$	$\nu_i = 0$	$0 \leq \varepsilon \leq 200 \text{ eV}$
5. $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow$ $\rightarrow \text{H}_2(C^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}(2l) + e$	$\nu_i = 0$	$0 \leq \varepsilon \leq 200 \text{ eV}$
6. $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow$ $\rightarrow \text{H}_2(B'^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow 2\text{H} + e$	$\nu_i = 0$	$0 \leq \varepsilon \leq 200 \text{ eV}$
7. $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow$ $\rightarrow \text{H}_2(D^1\Pi_u) + e \rightarrow 2\text{H} + e$	$\nu_i = 0$	$0 \leq \varepsilon \leq 200 \text{ eV}$
8. $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow$ $\rightarrow \text{H}_2(B''^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow 2\text{H} + e$	$\nu_i = 0$	$0 \leq \varepsilon \leq 200 \text{ eV}$
9. $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow$ $\rightarrow \text{H}_2(D'^1\Pi_u) + e \rightarrow 2\text{H} + e$	$\nu_i = 0$	$0 \leq \varepsilon \leq 200 \text{ eV}$

10. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow$ $\rightarrow H_2(b^3\Sigma_u^+) + e \rightarrow H(1s) + H(1s) + e$	$v_i = 0$	$0 \leq \varepsilon \leq 200 \text{ eV}$
Ионизация атома		
11. $H + e \rightarrow H^+ + e + e$	CS[122]	$0 \leq \varepsilon \leq 1000 \text{ eV}$
Процессы с участием тяжелых частиц		
12. $H_2^+ + H \rightarrow H_2 + H^+$	$K = 9.0 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$, [121]	
13. $H + H_2(v \geq 4) \rightarrow H + H_2^+$	$K = 2.5 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$, [121]	
14. $H + H + H_2 \rightarrow H_2(X, v = 14) + H_2$	$K = 2.68 \cdot 10^{-31} \cdot T^{-0.6} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$ [50]	
15. $H + H + H \rightarrow H_2(X, v = 14) + H$	$K = 8.04 \cdot 10^{-31} \cdot T^{-0.6} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$ [50]	
Рекомбинация		
16. $e + e + H^+ \rightarrow e + H(n)$	$K = 6.34 \cdot 10^{-27} n^2 \times$ $\times \frac{1}{T_e^3 (E_n^{2.33} + 4.38 E_n^{1.72} + 1.32 E_n)}$, $\text{cm}^6 \text{ s}^{-1}$ [121]	
17. $e + H^+ \rightarrow H + h\nu$	$K = 3.92 \cdot 10^{-14} \frac{1}{n} \times \frac{E_n^{1.5}}{E_n + 0.35}$, $\text{cm}^3 \text{ s}^{-1}$ [121]	
18. $e + e + H_2^+ \rightarrow e + 2H$	$K = 8.75 \cdot 10^{-27} T_e^{-4.5} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$ [50]	
19. $e + H_2^+ \rightarrow H(1) + H(n)$	CS, [121]	
20. $H_2^+ + H_2 \rightarrow H^+ + H + H_2$	CS, [46]	

Стоит также отметить, что в данной главе разрабатывалась кинетическая модель плазмохимических процессов, протекающих в пеннинговском разряде, с точки зрения влияния различных реакций на концентрацию основных химических компонент плазмы (H_2^+ , H_2 , H^+ , H , e). Данная модель [124] строилась на основе нульмерных расчетов для широкого диапазона средних энергий электронов и ионов водородной плазмы. Разработанная кинетическая схема может

применяться для расчета компонентного состава плазмы пеннинговского разряда в диффузионно-дрейфовых и PIC моделях. При этом в данных моделях важно правильно определять энергетику самих частиц, участвующих в химических превращениях, (электронов, молекулярных и атомарных ионов), для чего может понадобиться учет дополнительных процессов, отвечающих за потерю и набор заряженными частицами кинетической энергии. Так для расчета функции распределения по энергиям электронов в тлеющем разряде в молекулярном водороде некоторыми авторами был предложен (минимальный) набор кинетических процессов включающий, потерю электронами энергии в упругих столкновениях, потерю энергии на возбуждение первых трех вращательных и колебательных степеней свободы, а также основных (с точки зрения величины потери энергии и вероятности данного типа столкновения) электронных состояний молекулы. Помимо этого, в данный набор включены процессы диссоциации и ионизации молекулы. В пеннинговском разряде, по-видимому, упругие столкновения электронов с молекулами будут слабо влиять на энергетику электронов, в силу того, что они набирают очень высокую энергию в электрическом поле. Поэтому основные каналы сброса энергии для электронов - это возбуждение внутренних степеней свободы, ионизация и диссоциация нейтральных молекул. Для правильного определения энергии молекулярных и атомарных ионов также необходимо учитывать процессы упругого столкновения и перезарядки, т.к. они имеют значительно большие сечения, чем процессы диссоциации и ионизации ионным ударом, при этом в этих столкновениях ионы могут терять значительную часть своей энергии, передавая ее более холодным нейтральным молекулам водорода.

Глава 4. Согласованная физико-математическая модель динамики ионов и электронов в тлеющем разряде молекулярного азота и водорода

4.1. Численное моделирование двухмерной (2D) структуры тлеющего разряда в молекулярном азоте

Уравнения диффузионно-дрейфовой модели

Численная модель тлеющего разряда формулируется для осесимметричной геометрии. Предполагается, что разряд горит в режиме нормальной плотности тока между двумя плоскими электродами (Рис. 33), так что краевые эффекты (в радиальном направлении) не оказывают влияние на его структуру.

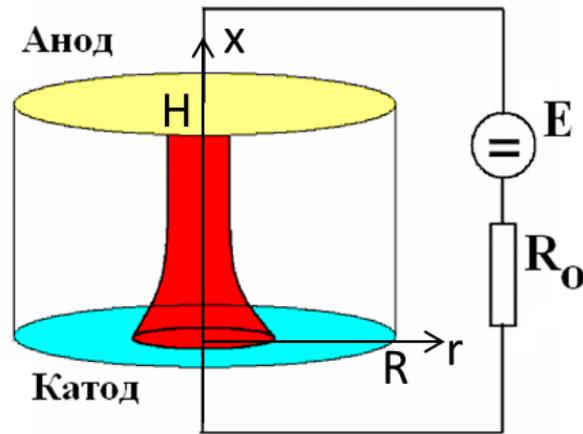


Рис. 33 Схема задачи.

Структура тлеющего разряда описывается в рамках диффузионно-дрейфовой модели, сформулированной относительно электронной и ионной компонент, включает уравнение Пуассона, определяющего распределение электрического потенциала в электроразрядном промежутке, и уравнение сохранения энергии нейтральных частиц в форме уравнения теплопроводности:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \text{div} \Gamma_e = \alpha(E/p) |\Gamma_e| - \beta n_+ n_e, \quad (62)$$

$$\frac{\partial n_+}{\partial t} + \text{div} \Gamma_+ = \alpha(E/p) |\Gamma_+| - \beta n_+ n_e, \quad (63)$$

$$\text{div}(\text{grad} \varphi) = 4\pi(n_e - n_+), \quad (64)$$

$$\rho c_v \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\lambda \text{grad} T) + Q, \quad (65)$$

$$\Gamma_e = -D_e \text{grad} n_e - n_e \mu_e \mathbf{E}$$

$$\Gamma_+ = -D_+ \text{grad} n_+ - n_+ \mu_+ \mathbf{E},$$

где $\mathbf{E} = -\text{grad} \varphi$, $Q = \eta(\mathbf{j} \cdot \mathbf{E})$, $\mathbf{j} = e(\Gamma_+ - \Gamma_e)$, x, r – осевая и радиальная координаты, T, p – температура и давление газа, n_e, n_+ – концентрации электронов и ионов, \mathbf{E} и φ – вектор напряженности электрического поля и его потенциал, Γ_e, Γ_+ – векторы плотностей потоков электронов и ионов, D_e, D_+ – коэффициенты диффузии электронов и ионов, μ_e, μ_+ – подвижности электронов и ионов, $\alpha = \alpha(E/p)$ – коэффициент ударной ионизации молекул электронами (первый коэффициент Таунсенда), β – коэффициент ион-электронной рекомбинации, η – феноменологический коэффициент эффективности передачи джоулева тепловыделения на нагрев газа.

При решении системы уравнений (62)-(65) используется ортогональная цилиндрическая система координат. Граничные условия для уравнений (62)-(64) имеют вид

$$x = 0, \Gamma_{e,x} = \gamma \Gamma_{+,x}, \frac{\partial n_+}{\partial x} = 0, \varphi = 0;$$

$$x = H, \frac{\partial n_e}{\partial x} = 0, n_+ = 0, \varphi = V;$$

$$r = 0, \frac{\partial n_e}{\partial r} = \frac{\partial n_+}{\partial r} = \frac{\partial \varphi}{\partial r} = 0;$$

$$r = R, 1) n_+ = n_e = 0, \varphi = \frac{V}{H} x \quad 2) \frac{\partial n_e}{\partial r} = \frac{\partial n_+}{\partial r} = \frac{\partial \varphi}{\partial r} = 0;$$

Здесь γ – коэффициент ион-электронной эмиссии с поверхности катода, V – падение напряжения на разрядном промежутке, $\Gamma_{e,x}, \Gamma_{+,x}$ – проекции потоков электронов на ось x .

Заметим, что выбранные граничные условия для системы уравнений диффузионно-дрейфовой модели (62)-(64) являются приближенными. Допустимость их использования обсуждена в работах [4], [85], [125].

Для нахождения падения напряжения V на разрядном промежутке необходимо учесть влияние внешней цепи. В условиях установившегося процесса горения тлеющего разряда можно записать очевидное соотношение

$$\frac{\varepsilon - V}{eR_0} = 2\pi \int_0^R \Gamma_e(r, x = H) r dr$$

Которое выражает равенство электродвижущей силы ε сумме напряжений на сопротивлении R_0 и разрядном промежутке. Все расчеты проводились при следующих параметрах: $p = 5 \text{ Тор}$, $\varepsilon = 2000 \text{ В}$, $\gamma = 0.1$, $R_0 = 300 \text{ к}\Omega$, $T_e = 11600 \text{ К}$, $H = 2 \text{ см}$.

Из представленной постановки задачи о тлеющем разряде следует, что многообразие элементарных газоплазменных процессов, определяющих его структуру, описывается посредством коэффициента ионизации α , подвижностей μ_e , μ_+ , диффузии D_e , D_+ , также коэффициентом эффективности передачи джоулева тепловыделения на нагрев газа. Далее будут рассмотрены способы их расчета.

Кинетические параметры модели

В расчетах двумерной структуры разряда коэффициент η не изменялся в пространстве, хотя в общем случае это не так. Этот коэффициент является параметром задачи и принимался равным 0,5 в соответствии с расчетами и оценками [2], [5], [126], [127], где рассматривались процессы возбуждения колебательных состояний двухатомных молекул в тлеющих разрядах. В данной работе оценки [2], [5], [126], [127] проверялись путем решения кинетического уравнения Больцмана. Расчеты показали, что практически во всей области разряда, кроме приэлектродных слоев, в исследованных условиях коэффициент $\eta \approx 0.4 \div 0.5$.

Предыдущие расчеты [74] показали, что использование уравнения Больцмана для определения подвижностей дает близкие результаты к величинам, используемым в литературе [2].

В условиях существования тлеющего разряда в молекулярном азоте вблизи нижнего предела (типичные характеристики такого разряда: падение напряжения на газоразрядном промежутке $V \approx 500 - 600$ В, полный ток через разрядный промежуток $I \approx 4-10$ мА). Из оценок [2] следует, что доминирующим процессом ионизации является ионизация молекул электронным ударом. Поэтому учитывается именно этот процесс. Однако заметим, что при увеличении тока через разряд, значительными становятся процессы ступенчатой ионизации молекул.

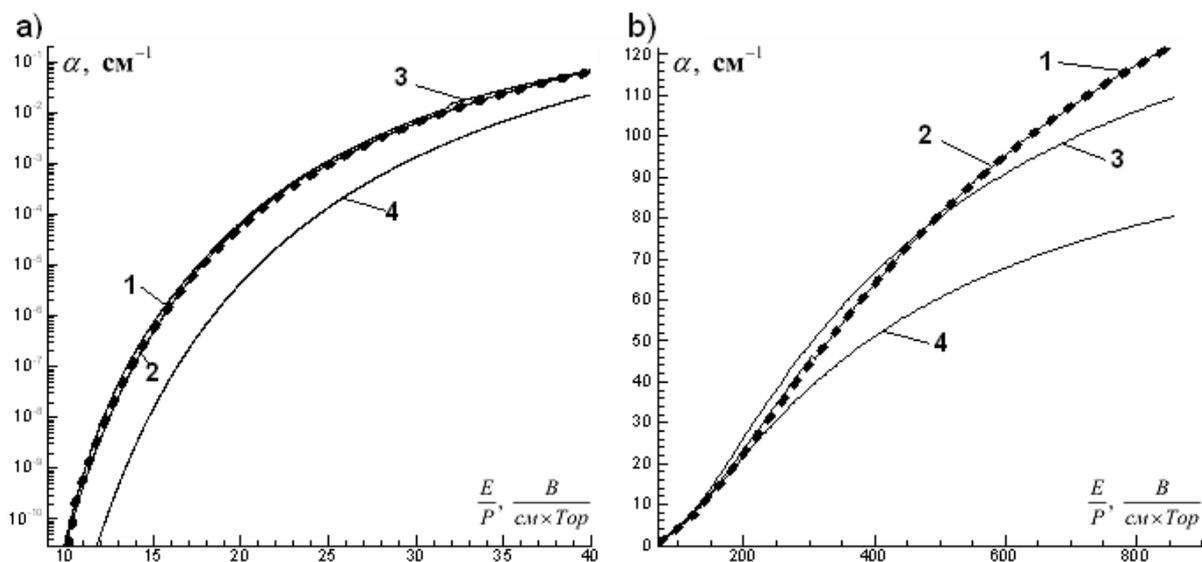


Рис. 34 Значения 1-го коэффициента Таунсенда в диапазоне E/p , характерных для положительного столба (а) и катодного слоя (б): 1- данные BOLSIG, 2 – аппроксимация [84] в виде (66), 3-аппроксимация [84] в виде (67), 4 – эмпирическая формула [88].

Поэтому коэффициенты подвижности и рекомбинации, входящие в математическую постановку задачи, задавались в виде:

$$\mu_e p = 4.4 \times 10^5, \quad \mu_+ p = 1.45 \times 10^3 \frac{\text{Тор} \times \text{см}^2}{\text{В} \times \text{с}},$$

$$\beta = 2 \times 10^{-7} \frac{\text{см}^3}{\text{с}}.$$

Значения коэффициента ионизации (1-го коэффициента Таунсенда) рассчитывались на основе численного решения уравнения Больцмана с использованием метода, изложенного в главе 1, а также по программе Bolsig+[84]. Для использования в двумерных расчетах данные, полученные по [84] аппроксимировались аналитической функцией :

$$\frac{\alpha}{p} = \exp(f(E/N)), (\text{смТор})^{-1}, \text{ где } f(x) = \sum_{n=0}^6 a_n x^n, \text{ при } \frac{E}{N} < 950, \text{ Тд и}$$

$$\frac{\alpha}{p} = \sum_{n=0}^6 a_n \left(\frac{E}{p}\right)^{-n}, (\text{см} \cdot \text{Тор})^{-1}, \text{ при } \frac{E}{N} > 950, \text{ Тд} \quad (66)$$

Здесь N - концентрация газа. Значения коэффициентов a_n приведены в Табл. 21. Заметим, что в работах [47,50] для расчета данного коэффициента использовалась эмпирическая формула:

$$\frac{\alpha}{p} = A \exp\left(-\frac{B}{E/p}\right) (\text{см} \cdot \text{Тор})^{-1}, \text{ где: } A = 12 (\text{см} \cdot \text{Тор})^{-1}, B = 342 \frac{\text{В}}{\text{см} \cdot \text{Тор}}. \quad (67)$$

Табл. 21. Значения коэффициентов аппроксимирующей функции (66) 1-го коэффициента Таунсенда.

	$\frac{E}{N} < 62$ Тд	$62 < \frac{E}{N} < 100$ Тд	$100 < \frac{E}{N} < 950$ Тд	$\frac{E}{N} > 950$ Тд
a_6	-2,16E-07	-6,28E-08	-6,88E-14	2,32719E+13
a_5	3,04E-05	1,07E-05	8,90E-11	-1,3273E+12
a_4	-1,74E-03	-7,60E-04	-4,60E-08	3,10E+10
a_3	5,20E-02	2,80E-02	1,21E-05	-3,83E+08
a_2	-9,00E-01	-6,22E-01	-2,00E-03	1,36E+07
a_1	8,42E+00	7,34E+00	1,14E-01	-5,56E+04
a_0	-37,29	-39,75	-3,29	22

Эти значения рекомендованы в работе [88]. Сравнение значений коэффициента ионизации, рассчитанных по (66) и по программе [84], показаны на Рис. 34. Сравнение выполнено для типичных условий в катодном слое и положительном столбе.

Приведенные коэффициенты подвижности и ионизации обеспечивают решение задачи об электродинамической структуре тлеющего разряда, включая приэлектродные слои и положительный столб. Однако при использовании только этих коэффициентов не удастся решить задачу о нагреве газа в разряде и заселенностях возбужденных колебательных и электронных состояний. В феноменологических диффузионно-дрейфовых моделях разряда (62)-(64) нагрев нейтрального газа удастся рассчитать при введении коэффициента η , задающую долю Джоулева тепловыделения, идущую в нагрев газа, в то время, как величина $\delta = (1 - \eta)$ задает долю энергии, идущую на возбуждение колебательных и электронных состояний.

Аппроксимация данных [84] в виде (66) дает значения коэффициентов A и B , приведенные в Табл. 22.

Табл. 22. Значения коэффициентов аппроксимирующей функции (67) 1-го коэффициента Таунсенда.

	$\frac{E}{N} < 72$ Тд	$72 < \frac{E}{N} < 200$ Тд	$200 < \frac{E}{N} < 2400$ Тд
$A, (\text{см} \cdot \text{Тор})^{-1}$	11,77	7,6312	16,89
$B, \frac{B}{\text{см} \cdot \text{Тор}}$	289,49	281,87	372,15

Результаты численного моделирования

Расчеты тлеющего разряда проводились в геометрии, показанной на Рис. 33. Расчет двумерной структуры тлеющего разряда проводился с использованием модели, описанной в п. 1) постановки задачи. После этого проводился расчет

доли энергии, затрачиваемой электронами на возбуждение электронных и колебательных степеней свободы молекул. Расчет проводился на основе полученного решения по двумерной структуре разряда и кинетических параметров плазмы, рассчитанных с использованием решения уравнения Больцмана. Рассматривается тлеющий разряд, горящий в молекулярном азоте. В расчетах задавались следующие значения параметров, входящих в математическую постановку задачи: $\varepsilon = 2000\text{В}$, $\gamma = 0.1$, $R_0 = 300\text{ к}\Omega$, $T_e = 11600\text{К}$, $H = 2\text{ см}$. Вычислительные эксперименты проводились при разных давлениях с учетом и без учета нагрева. Сначала рассчитывалась структура тлеющего разряда с использованием эмпирического 1-го коэффициента Таунсенда (67), затем – рассчитанного с учетом решения кинетического уравнения Больцмана (66).

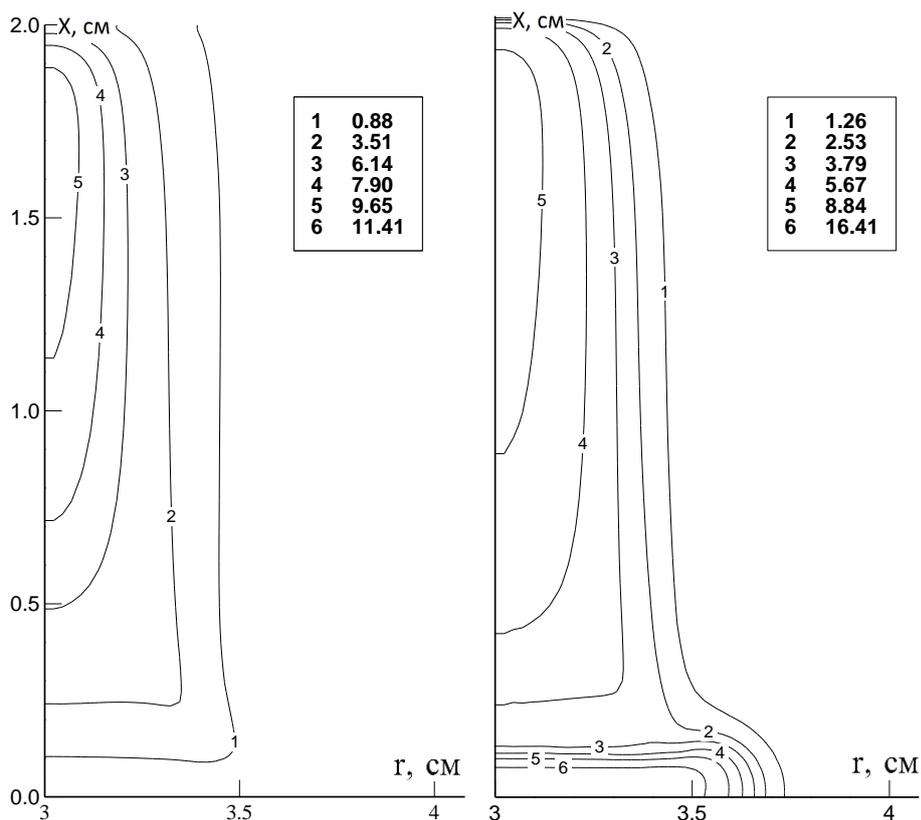


Рис. 35 Структура тлеющего разряда при $p=5$ Тор, $\varepsilon=2$ кВ; концентрация электронов (а) и ионов (б), концентрация отнесена к 10^9 см^{-3} .

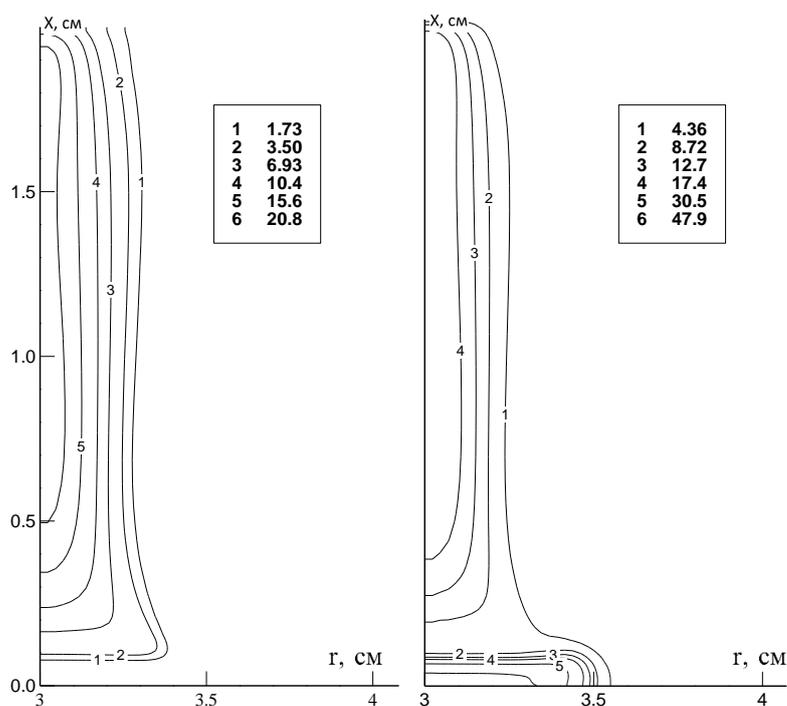


Рис. 36 Структура тлеющего разряда при $p=10$ Тор, $\varepsilon=2$ кВ; концентрация электронов(а) и ионов(б), концентрация отнесена к 10^9 см^{-3} .

Результаты расчетов структуры тлеющего разряда при $p=5$ и $p=10$ Тор показаны на Рис. 35 и Рис. 36. Влияние новых значений коэффициента ионизации на структуру тлеющего разряда при $p=5$ и $p=10$ Тор. наглядно иллюстрируется на Рис. 37 и Рис. 38, где даны радиальные распределения плотностей тока на электродах и осевое распределение концентрации заряженных частиц вдоль оси симметрии тлеющего разряда. Использование кинетического уравнения Больцмана для расчета параметров диффузионно-дрейфовой модели приводит к следующим изменениям в структуре тлеющего разряда: уменьшается плотность тока на аноде и увеличивается на катоде, увеличиваются радиальные размеры тлеющего разряда, уменьшается напряженность поля во всем электроразрядном промежутке, увеличивается концентрация ионов и электронов в положительном столбе (при этом наблюдается смещение локального максимума концентрации от анода к катоду),

увеличивается концентрация ионов и температура нейтрального газа в катодном слое.

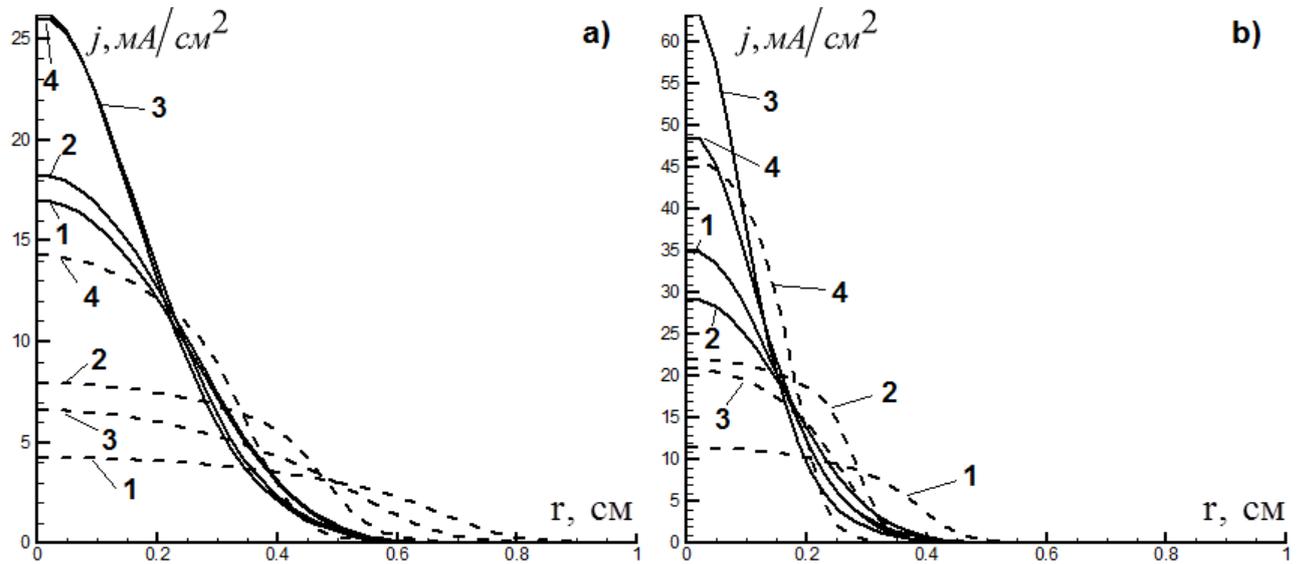


Рис. 37 Плотность тока на катоде (сплошные линии) и аноде (штриховые линии) при $p=10$ Тор (а) и $p=5$ Тор (б): 1-без учета нагрева, данные (67); 2 – без учета нагрева, данные (66); 3 – с учетом нагрева и данных(67); 4 – с учетом нагрева и данных(66).

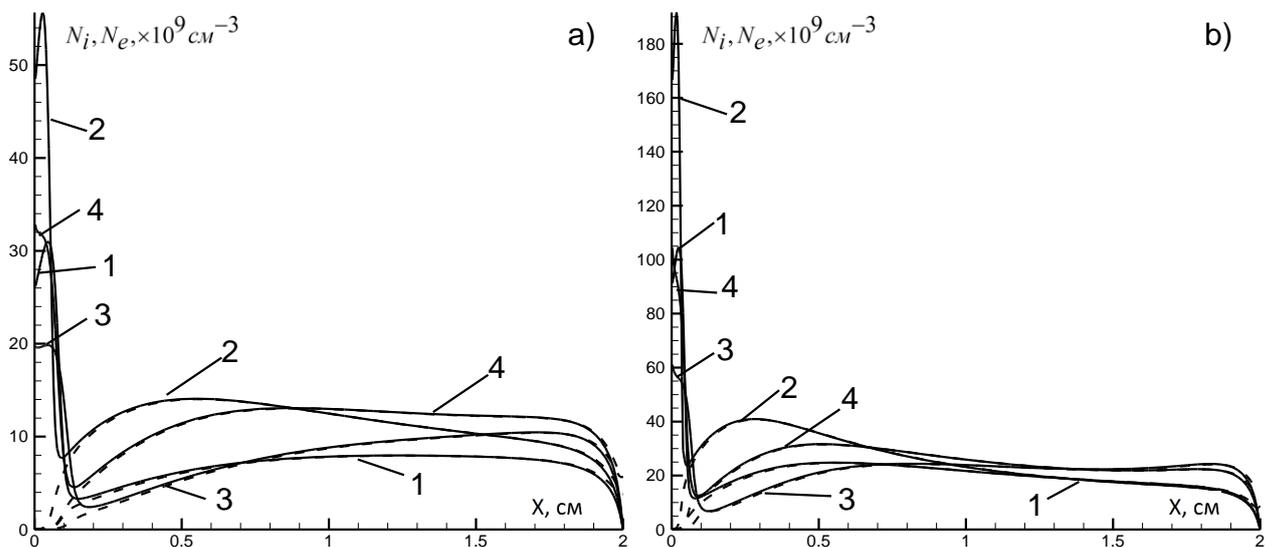


Рис. 38 Концентрация ионов(сплошные линии) и электронов(штриховые линии) при $p=5$ Тор (а) и $p=10$ Тор (б): 1-без учета нагрева, данные (67); 2 – без учета нагрева, данные (66); 3 – с учетом нагрева и данных(67); 4 – с учетом нагрева и данных(66).

В данной модели источником нагрева газа является джоулево тепловыделение, обусловленное нагревом нейтрального газа тлеющего разряда за счет

столкновения молекул с электронами, которые получают энергию от электрического поля.

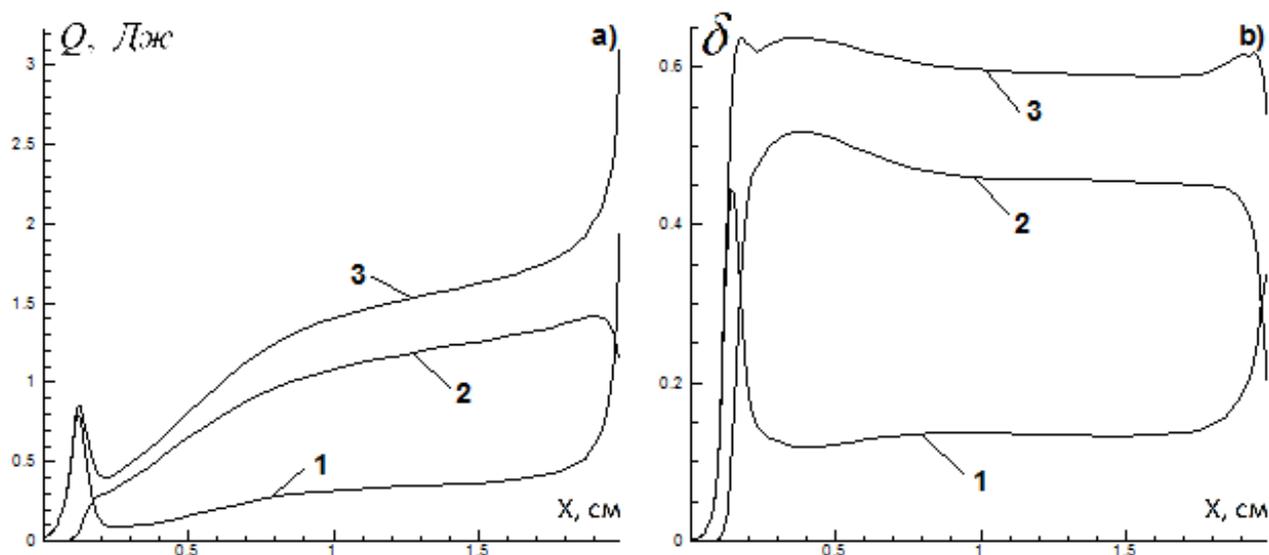


Рис. 39 Энергия, идущая на возбуждение внутренних степеней свободы (а) и эффективность передачи энергии электронов во внутренние степени свободы молекул (б): 1 – электронные уровни, 2 – колебательные уровни основного состояния, 3 – сумма всех электронных и колебательных уровней.

Хорошо известно, что значительная часть энергии электронов тратится на возбуждение колебательных степеней свободы молекул. Доля этой энергии находится из решения кинетического уравнения для функции распределения электронов по энергиям. Очевидно также, что в различных пространственных зонах тлеющего разряда соотношение между энергией джоулева тепловыделения и энергией, идущей на возбуждение внутренних степеней свободы, будет различным (Рис. 39). На Рис. 40 представлены распределения концентрации заряженных частиц и температуры молекулярного азота вдоль оси тлеющего разряда, полученные при различных значениях коэффициента η .

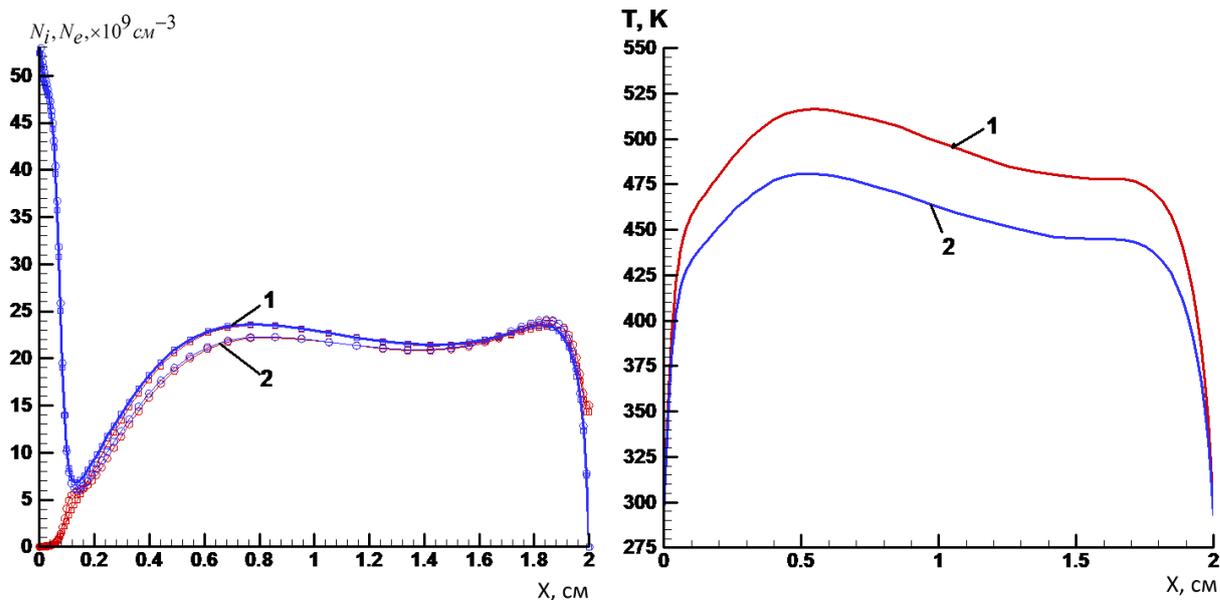


Рис. 40 Профили концентрации заряженных частиц, и температуры нейтрального газа в зависимости от значения коэффициента η : 1 – $\eta=0.5$, 2 – $\eta=0.4$

Расчет доли энергии, идущей в джоулев нагрев, проводился по следующей методике: сначала выполнялся расчет программой BOLSIG+ частот неупругих столкновений электронов с молекулами азота,

$$k_k = \gamma \int_0^{\infty} u \sigma_k(u) f_0(u) du, \quad \gamma = (2e/m)^{1/2}$$

где e, m - заряд и масса электрона, $\sigma_k(u)$ - сечение возбуждения внутренних степеней свободы молекулы N_2 , k – номер колебательного, или электронного уровня, функция распределения электронов по энергиям нормирована условием:

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

Затем рассчитывалась энергия, запасаемая в колебательных уровнях (учитывалось 8 колебательных уровней) основного состояния и различных электронно-возбужденных состояниях, а также эффективность передачи преобразования энергии в внутренние степени свободы молекул:

$$E_{exit}^k = N n k_k u_k,$$

$$\delta = \frac{\sum_k E_{exit}^k}{\mathbf{j} \cdot \mathbf{E}}$$

где n , N – концентрации электронов и молекул нейтрального газа, u_k - пороговая энергия возбуждения k -го (колебательного или электронного) уровня.

На Рис. 39а показаны результаты расчетов суммарной энергии электронов, затрачиваемой на возбуждение колебательных уровней, и энергии электронно-возбужденных состояний вдоль оси тлеющего разряда. На Рис. 39б представлены соответствующие эффективности преобразования энергии электронов нормального тлеющего разряда в колебательно возбужденные и электронно-возбужденные степени свободы.

Видно, что в катодном слое значительная часть энергии тратится на возбуждение электронных состояний. Полученные расчетные данные по доли энергии, идущей в колебательные степени свободы, находятся в качественном согласии с данными [26].

Представляет практический интерес анализ распределения энергии между различными электронно-возбужденными состояниями N_2 . На Рис. 41 даны осевые распределения энергии возбуждения не только отдельных электронных состояний, но и различных колебательных уровней состояния $A^3\Sigma_u^+$. Видно, что в катодном слое наибольшая энергия тратится на возбуждение состояния $C^3\Pi$, а в положительном столбе на возбуждение электронного состояния $B^3\Pi_g$.

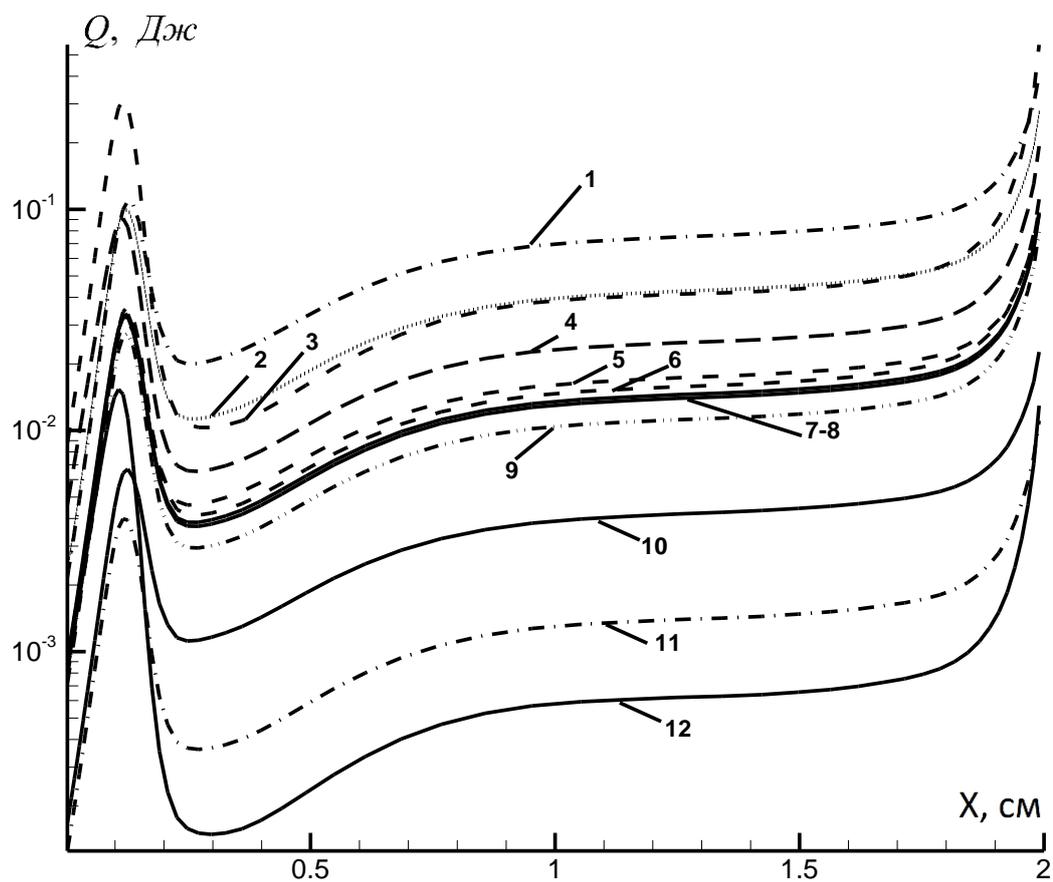


Рис. 41 Энергия, запасаемая в различных электронно-возбужденных уровнях N_2 : 1 - $B^3\Pi_g$, 2 - $W^3\Delta$, 3 - $C^3\Pi$, 4 - $A^1\Pi$, 5 - $A^3\Sigma_u^+(\nu=5-9)$, 6 - $W^1\Delta$, 7 - $A^3\Sigma_u^+(\nu>10)$, 8 - $B'^3\Sigma$, 9 - $A'^1\Sigma$, 10 - $A^3\Sigma_u^+(\nu>10)$, 11 - $E^3\Delta$, 12 - $A''^1\Sigma$

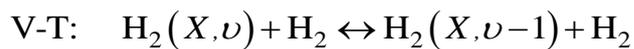
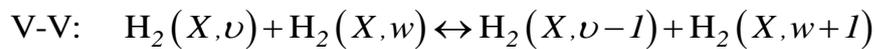
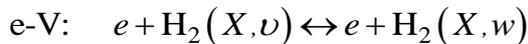
4.2. Численное моделирование двухмерной (2D) структуры тлеющего разряда в молекулярном водороде

Поуровневая колебательная кинетика

Колебательная кинетика молекулярного водорода в основном электронном состоянии $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu)$ (далее используется обозначение $H_2(X, \nu)$) описывается моделью поуровневой кинетики ангармонических осцилляторов, которая включает процессы возбуждения колебательных состояний электронным ударом, (eV) и колебательно-колебательный (VV) и колебательно-поступательный (VT) энергообмен в приближении одноквантовых переходов:

$$\begin{aligned} \frac{dH_2(X, \nu)}{dt} = & n_e \sum_{w < \nu} H_2(X, w) k_{w \rightarrow \nu}^{vib} + n_e \sum_{w > \nu} H_2(X, w) k_{w \rightarrow \nu}^{vib} - \\ & - n_e H_2(X, \nu) \left(\sum_{w < \nu} k_{\nu \rightarrow w}^{vib} + \sum_{w > \nu} k_{\nu \rightarrow w}^{vib} \right) + H_2(X, \nu - 1) \sum_{w > 0} H_2(X, w) K_{\nu-1, \nu}^{w+1, w} + \\ & + H_2(X, \nu + 1) \sum_w H_2(X, w) K_{\nu+1, \nu}^{w, w+1} - H_2(X, \nu) \sum_w H_2(X, w) K_{\nu, \nu-1}^{w, w+1} - \\ & - H_2(X, \nu) \sum_m H_2(X, w+1) K_{\nu, \nu+1}^{w-1, w} + H_2(X, \nu - 1) [H_2] P_{\nu-1, \nu} + \\ & + H_2(X, \nu + 1) [H_2] P_{\nu+1, \nu} - H_2(X, \nu) [H_2] P_{\nu, \nu-1} - H_2(X, \nu) [H_2] P_{\nu, \nu+1}, \end{aligned}$$

где ν и w колебательные квантовые числа, $[H_2]$ концентрация молекул водорода. Различные каналы энергообмена описываются следующими символическими уравнениями:



Для описания процессов возбуждения и девозбуждения колебательных состояний молекулярного водорода рассматривались 14 колебательных состояний молекулы. Константы скорости процессов возбуждения колебательных состояний электронным ударом рассчитывались как свертка

рассчитанной из уравнения Больцмана ФРЭЭ с соответствующим сечением рассеяния.

Для VT процессов:

$$P_{\nu+1,\nu}(T) = (\nu+1)P_{1,0} \exp(\nu\delta_{VT}) \exp\left(-\frac{\nu hc\omega_e \chi_e}{kT}\right),$$

$$P_{\nu,\nu+1}(T) = P_{\nu+1,\nu}(T) \exp\left(-\frac{(\omega_e - 2\omega_e \chi_e)hc}{kT}\right) \times \\ \times \exp\left(-\frac{2\nu hc\omega_e \chi_e}{kT}\right),$$

$$P_{0,1}(T) = P_{1,0}(T) \exp\left(-\frac{(\omega_e - 2\omega_e \chi_e)hc}{kT}\right),$$

$$\delta_{VT} = 0.87$$

$$P_{1,0} = 4.61 \times 10^{-16}, \quad \frac{\text{cm}^3}{\text{s}}$$

Для VV процессов:

$$K_{\nu+1,\nu}^{w,w+1} = (w+1)(\nu+1)K_{1,0}^{0,1} \exp(-\delta_{VV}|\nu-w|) \times \\ \left[\frac{3}{2} - \frac{1}{2} \exp(-\delta_{VV}|\nu-w|) \right] \exp\left(|\nu-w| \frac{hc\omega_e \chi_e}{kT}\right),$$

$$K_{\nu,\nu+1}^{w+1,w} = K_{\nu+1,\nu}^{w,w+1} \exp\left(\frac{2(\nu-w)hc\omega_e \chi_e}{kT}\right),$$

$$\delta_{VV} = 1.06,$$

$$K_{1,0}^{0,1} \approx 3.9 \times 10^{-13}, \quad \frac{\text{cm}^3}{\text{s}}.$$

Как уже отмечалось в предыдущем разделе, кинетическая схема, описывающая кинетику ионизации и диссоциации водорода в газовом разряде должна включать следующие основные механизмы: возбуждение колебательных состояний молекулы с учетом прямых и ступенчатых механизмов, VV- и VT-переходы в молекуле, два механизма ионизации молекулы водорода (протекающих с образованием ионов $\text{H}_2^+(X^2\Sigma_g^+)$ и $\text{H}_2^+(X^2\Sigma_u^+)$) и ступенчатую

диссоциацию молекулы основного и возбужденных состояний, рекомбинацию и конверсию ионов, процессы диссоциативной ионизации, реакции тяжелых частиц (молекул, атомов, молекулярных и атомарных ионов).

Для проверки работоспособности используемой в работе кинетической схемы для расчета компонентного состава плазмы было выполнено численное моделирование двухмерной структуры классического тлеющего разряда. Численная модель тлеющего разряда формулируется для осесимметричной геометрии. Предполагается, что разряд горит в режиме нормальной плотности тока между двумя плоскими электродами, так что граничные эффекты в радиальном направлении не оказывают влияния на структуру разряда.

Структура тлеющего разряда описывается с использованием уравнений диффузионно-дрейфовой модели, сформулированной для электронной и ионной компонент. Модель включает также уравнение Пуассона, определяющее распределение электрического потенциала в газоразрядной камере, а также закон сохранения энергии нейтральных частиц в форме уравнения теплопроводности.

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \text{div}\Gamma_e = \alpha(E/p)|\Gamma_e| - \beta n_+ n_e, \quad (68)$$

$$\frac{\partial n_+}{\partial t} + \text{div}\Gamma_+ = \alpha(E/p)|\Gamma_+| - \beta n_+ n_e, \quad (69)$$

$$\text{div}(\text{grad}\varphi) = 4\pi(n_e - n_+), \quad (70)$$

$$\rho c_V \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\lambda \text{grad}T) + Q, \quad (71)$$

$$\Gamma_e = -D_e \text{grad}n_e - n_e \mu_e \mathbf{E}, \quad \Gamma_+ = -D_+ \text{grad}n_+ - n_+ \mu_+ \mathbf{E},$$

где $\mathbf{E} = -\text{grad}\varphi$, $Q = \eta(\mathbf{j} \cdot \mathbf{E})$, $\mathbf{j} = e(\Gamma_+ - \Gamma_e)$, x, r аксиальная и радиальная координаты; T, p температура и давление газа; n_e and n_+ концентрации электронов и ионов; \mathbf{E} and φ вектор напряженности электрического поля и его потенциал; Γ_e, Γ_+ векторы потоков электронов и ионов; D_e, D_+ коэффициенты диффузии

электронов и ионов; μ_e , μ_+ подвижности электронов и ионов; $\alpha = \alpha(E/p)$ коэффициент ударной ионизации молекул электронами (1-й коэффициент Таунсенда); β коэффициент ион-электронной рекомбинации; η коэффициент эффективности передачи Джоулева тепла на нагрев газа.

При решении уравнений (68)–(71) использовалась ортогональная цилиндрическая система координат. Граничные условия для уравнений (68)–(70) имеют следующий вид:

$$x = 0, \Gamma_{e,x} = \gamma \Gamma_{+,x}, \frac{\partial n_+}{\partial x} = 0, \varphi = 0,$$

$$x = H, \frac{\partial n_e}{\partial x} = 0, n_+ = 0, \varphi = V,$$

$$r = 0, \frac{\partial n_e}{\partial r} = \frac{\partial n_+}{\partial r} = \frac{\partial \varphi}{\partial r} = 0,$$

$$r = R, 1) n_+ = n_e = 0, \varphi = \frac{V}{H} x,$$

$$\text{или } 2) \frac{\partial n_e}{\partial r} = \frac{\partial n_+}{\partial r} = \frac{\partial \varphi}{\partial r} = 0.$$

Здесь, γ коэффициент вторичной электронной эмиссии с поверхности катода, V падение потенциала электрического поля на газоразрядном промежутке; $\Gamma_{e,x}$, $\Gamma_{+,x}$ проекции потоков электронов и ионов на ось x .

Кинетические параметры модели

Значения коэффициента ионизации (1го коэффициента Таунсенда), подвижности и диффузии рассчитывались по следующим формулам:

$$\mu_e N = -\frac{\gamma'}{3} \int_0^\infty \frac{\varepsilon}{\sigma_m} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\varepsilon, \quad D_e N = \frac{\gamma'}{3} \int_0^\infty \frac{\varepsilon}{\sigma_m} f_0 d\varepsilon, \quad k_{ioniz} = \frac{\gamma' \int_0^\infty \varepsilon \sigma_{ioniz} f_0 d\varepsilon}{N n_e},$$

$$\frac{\alpha(E/N)}{N} = \frac{k_{ioniz}}{\mu_e E}, \quad \gamma' = \sqrt{\frac{2e}{m_e}},$$

где N концентрация нейтральных молекул газа, σ_m транспортное сечение рассеяния электронов на молекулах, σ_{ioniz} сечение ионизации, ε энергия электронов в eV, f_0 функция распределения электронов по энергиям, k_{ioniz} константа скорости ионизации электронным ударом, e и m_e заряд и масса электрона.

Функция распределения электронов по энергиям рассчитывается из решения кинетического уравнения Больцмана, на основе методики, изложенной ниже. В данной работе учитывалось изменение температуры нейтрального газа. В соответствии с этим зависимость транспортных и термофизических свойств от температуры задавались следующими формулами:

$$\mu_i(p^*) = \frac{2280}{p^*}, \frac{\text{cm}^2}{\text{Volt} \cdot \text{s}},$$

$$p^* = p \frac{293}{T}, \text{ Torr},$$

$$D_i = \mu_i(p^*)T,$$

$$c_p = 8.314 \frac{7}{2} \frac{1}{M_\Sigma}, \frac{\text{J}}{\text{g} \cdot \text{K}}, M_\Sigma = 28 \frac{\text{g}}{\text{mol}},$$

$$\rho = 1.58 \times 10^{-5} \frac{M_\Sigma p}{T} \frac{\text{g}}{\text{cm}^3},$$

$$\lambda = \frac{8.334 \times 10^{-4}}{\sigma^2 \Omega^{(2.2)*}} \sqrt{\frac{T}{M_\Sigma}} \left(0.115 + 0.354 \frac{c_p M_\Sigma}{R_g} \right),$$

$$\Omega^{(2.2)*} = \frac{1.157}{(T^*)^{0.1472}}, \quad T^* = \frac{T}{(\varepsilon/k)}, \quad (\varepsilon/k) = 71.4 \text{K}, \quad \sigma = 3.68 \text{\AA}, \quad R_g = 8.314 \frac{\text{J}}{\text{K} \cdot \text{mol}},$$

где p начальное давление. Коэффициент рекомбинации β был положен равным $\beta = 2 \times 10^{-7} \text{ cm}^3/\text{s}$.

Кинетическое уравнение Больцмана

Кинетическое уравнение Больцмана для электронов решается для того, чтобы учесть влияние неравновесной ФРЭЭ на кинетические параметры плазмы тлеющего разряда [96], [128]. В данной работе уравнение Больцмана для электронов решается в двучленном приближении (приближение Лоренца):

$$\frac{E^2}{3} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\frac{\varepsilon}{N\sigma_{el}} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) + \frac{2m_e}{M} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\varepsilon^2 N \sigma_{el} f \right) + \frac{2m_e kT}{Me} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\varepsilon^2 N \sigma_{el} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) = C_0^{vib} + C_0^{el}, \quad (72)$$

$$\begin{aligned} C_0^{vib} = & \varepsilon f(\varepsilon) \sum_{v=0}^{N_v^*-1} N_v^{vib} \sum_{w=v+1}^{N_v^*} \sigma_{v \rightarrow w}^{vib}(\varepsilon) - \\ & - \sum_{v=0}^{N_v^*-1} N_v^{vib} \sum_{w=v+1}^{N_v^*} \left(\varepsilon + \varepsilon_{v \rightarrow w}^{vib} \right) f \left(\varepsilon + \varepsilon_{v \rightarrow w}^{vib} \right) \sigma_{v \rightarrow w}^{vib} \left(\varepsilon + \varepsilon_{v \rightarrow w}^{vib} \right) + \\ & + \varepsilon f(\varepsilon) \sum_{v=1}^{N_v^*} N_v^{vib} \sum_{w=v-1}^{N_v^*-1} \sigma_{v \rightarrow w}^{vib}(\varepsilon) - \\ & - \sum_{v=1}^{N_v^*} N_v^{vib} \sum_{w=v-1}^{N_v^*-1} \left(\varepsilon - \varepsilon_{v \rightarrow w}^{vib} \right) f \left(\varepsilon - \varepsilon_{v \rightarrow w}^{vib} \right) \sigma_{v \rightarrow w}^{vib} \left(\varepsilon - \varepsilon_{v \rightarrow w}^{vib} \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} C_0^{el} = & \varepsilon f(\varepsilon) N_0^{vib} \sum_{v=1}^{N_e^*} \sigma_{0 \rightarrow v}^{el}(\varepsilon) - \sum_{v=1}^{N_e^*} \left(\varepsilon + \varepsilon_{0 \rightarrow v}^{el} \right) f \left(\varepsilon + \varepsilon_{0 \rightarrow v}^{el} \right) N_0^{vib} \sigma_{0 \rightarrow v}^{el} \left(\varepsilon + \varepsilon_{0 \rightarrow v}^{el} \right) + \\ & + \varepsilon f(\varepsilon) \sum_{v=1}^{N_e^*} N_v^{el} \sigma_{v \rightarrow 0}^{el}(\varepsilon) - \sum_{v=1}^{N_e^*} \left(\varepsilon - \varepsilon_{v \rightarrow 0}^{el} \right) f \left(\varepsilon - \varepsilon_{v \rightarrow 0}^{el} \right) N_v^{el} \sigma_{v \rightarrow 0}^{el} \left(\varepsilon - \varepsilon_{v \rightarrow 0}^{el} \right), \end{aligned}$$

где $\varepsilon = m_e v^2 / 2e$; v, e, m_e - скорость, заряд и масса электрона; M, N, T масса, концентрация и температура молекул водорода; N_v^{el} , N_v^{vib} - заселенности электронно- и колебательно- возбужденных состояний; E - напряженность электрического поля; σ_{el} - транспортное сечение рассеяния; $\sigma_{v \rightarrow w}^{vib}$, $\sigma_{v \rightarrow w}^{el}$ - сечение неупругого возбуждения колебательных состояний основного электронного уровня, а также различных электронных состояний молекул водорода; $\varepsilon_{v \rightarrow w}^{vib}$, $\varepsilon_{v \rightarrow w}^{el}$ - пороговые значения энергии; N_v^* , N_e^* - суммарное количество неупругих процессов колебательного и электронного возбуждения молекул. Функция распределения нормируется следующим условием:

$$\int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} f(\varepsilon) d\varepsilon = 1.$$

Сечения процессов девозбуждения рассчитываются с использованием соотношения Клейна-Росселанда, выражающего принцип детального равновесия для соударений 1го и 2го рода:

$$(\varepsilon - \varepsilon_{\nu \rightarrow w}) \sigma_{w \rightarrow \nu}(\varepsilon - \varepsilon_{\nu \rightarrow w}) = \exp(-\varepsilon_{\nu \rightarrow w}) \varepsilon \sigma_{\nu \rightarrow w}(\varepsilon), \quad \varepsilon \geq \varepsilon_{\nu \rightarrow w}, \quad w > \nu.$$

Хорошо известно, что значительная часть энергии электронов тратится на возбуждение колебательных степеней свободы молекул. Доля этой энергии рассчитывается из решения кинетического уравнения Больцмана. Очевидно также, что доля энергии, вложенной во внутренние степени свободы, по отношению к Джоулеву нагреву газа будет различной в разных пространственных областях тлеющего разряда.

Расчет доли энергии, затраченной на возбуждение внутренних степеней свободы, выполнялся с использованием следующей методики: сначала рассчитывались константы скорости неупругих столкновений электронов с молекулами, затем рассчитывалось отношение суммарных затрат энергии во все рассматриваемые колебательные или электронные состояния к Джоулеву теплу:

1. Колебательное возбуждение:

$$k_{\nu \rightarrow w}^{vib} = \gamma' \int_0^{\infty} \varepsilon \sigma_{\nu \rightarrow w}^{vib}(\varepsilon) f_0(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (73)$$

$$E_{exit} = \sum_{\nu=0}^{N_v^*-1} \sum_{w=\nu+1}^{N_v^*} N_\nu n_e k_{\nu \rightarrow w}^{vib} \varepsilon_{\nu \rightarrow w}^{vib} - \sum_{\nu=1}^{N_v^*} \sum_{w=\nu-1}^{N_v^*-1} N_\nu n_e k_{\nu \rightarrow w}^{vib} \varepsilon_{\nu \rightarrow w}^{vib}$$

$$\eta^{vib} = \frac{E_{exit}^{vib}}{\mathbf{j} \cdot \mathbf{E}}$$

2. Электронное возбуждение:

$$k_{\nu \rightarrow w}^{el} = \gamma' \int_0^{\infty} \varepsilon \sigma_{\nu \rightarrow w}^{el}(\varepsilon) f_0(\varepsilon) d\varepsilon,$$

$$E_{exit} = \sum_{w=1}^{N_e^*} N_w n_e k_{0 \rightarrow w}^{el} \mathcal{E}_{0 \rightarrow w}^{el} - \sum_{v=1}^{N_v^*} N_v n_e k_{v \rightarrow 0}^{el} \mathcal{E}_{v \rightarrow 0}^{el}$$

$$\eta^{el} = \frac{E_{exit}}{\mathbf{j} \cdot \mathbf{E}}$$

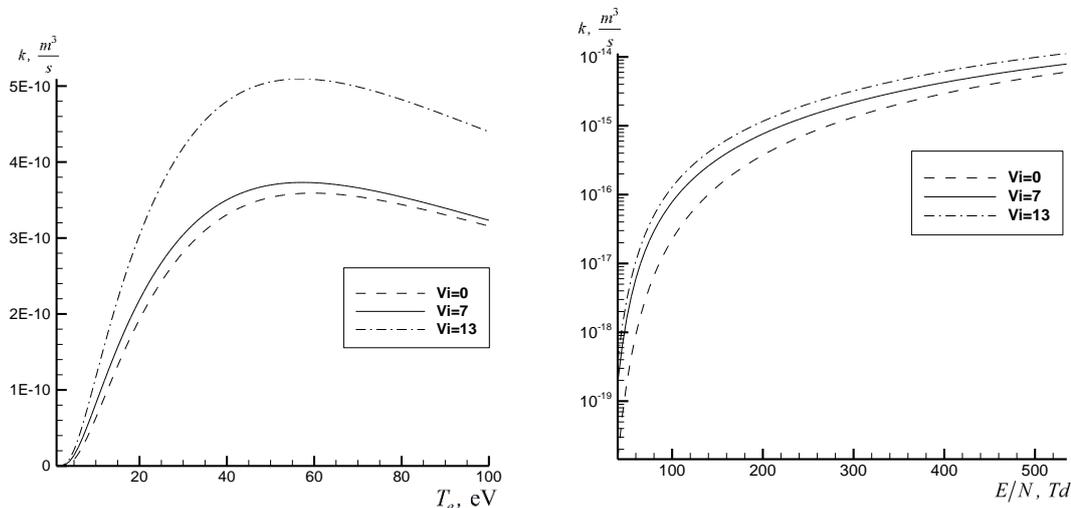


Рис. 42 Зависимость константы скорости от температуры электронов (для максвелловской ФРЭ) и величины приведенного электрического поля (для ФРЭ, рассчитанной из решения кинетического уравнения Больцмана) для различных колебательных квантовых чисел основного электронного состояния молекулы водорода в реакции $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(X^2\Sigma_g^+) + e$.

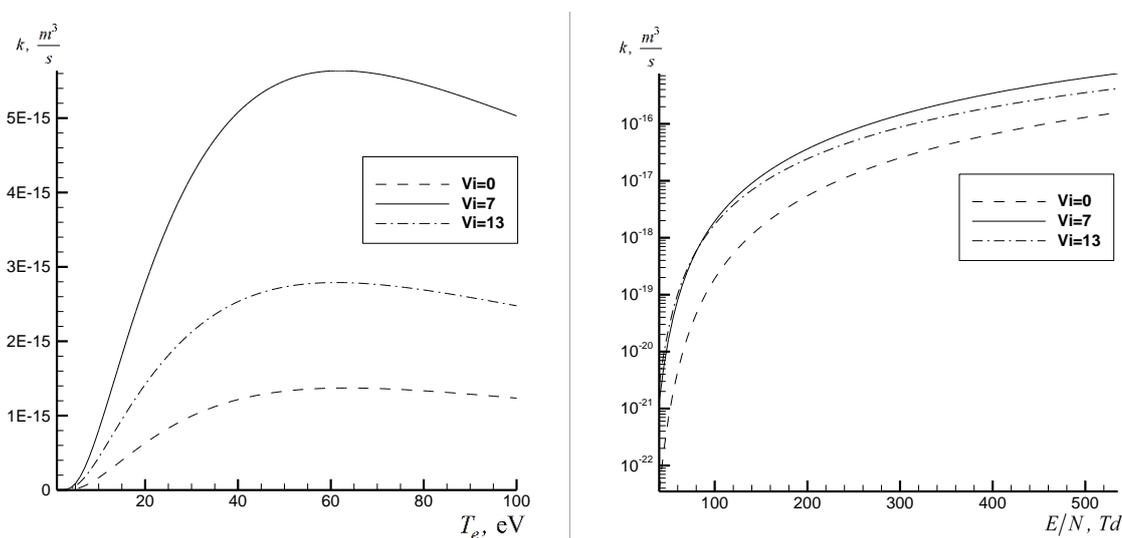


Рис. 43 Зависимость константы скорости от температуры электронов (для максвелловской ФРЭ) и величины приведенного электрического поля (для ФРЭ, рассчитанной из решения кинетического уравнения Больцмана) для различных колебательных квантовых чисел основного электронного состояния молекулы водорода в реакции $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(X^2\Sigma_g^+) + 2e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}^+ + 2e$.

Константы скорости процессов с участием электронов рассчитывались как свертка функции распределения электронов по энергиям с соответствующим сечением рассеяния. Константы скорости, рассчитанные с использованием максвелловской и нематвелловской ФРЭЭ (рассчитанной из кинетического уравнения Больцмана) представлены на Рис. 42 - Рис. 44.

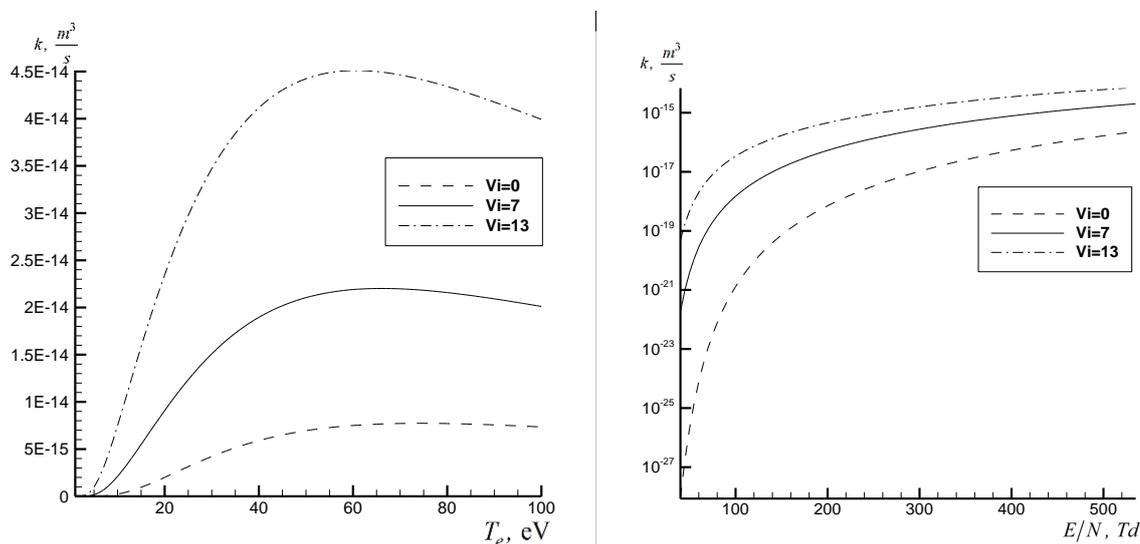


Рис. 44 Зависимость константы скорости от температуры электронов (для максвелловской ФРЭ) и величины приведенного электрического поля (для ФРЭ, рассчитанной из решения кинетического уравнения Больцмана) для различных колебательных квантовых чисел основного электронного состояния молекулы водорода в реакции $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(X^2\Sigma_u^+) + 2e \rightarrow H(1s) + H^+ + 2e$.

Численное моделирование тлеющего разряда с использованием поуровневой кинетической модели

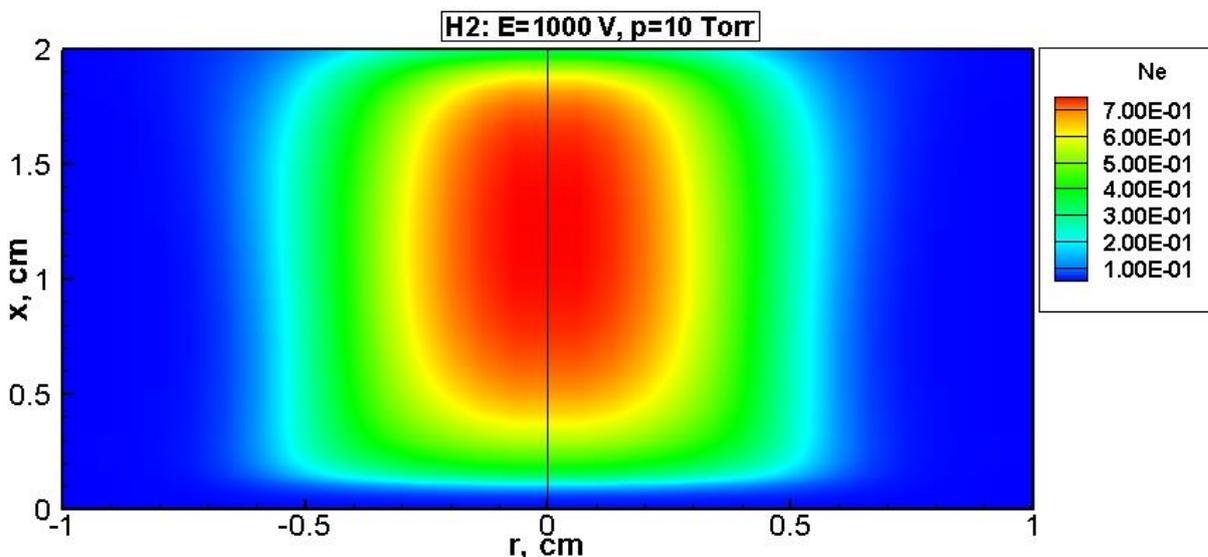


Рис. 45 Пространственные распределения концентрации электронов $p = 10$ Торр, $E = 1$ кВ, $\gamma = 0.33$, $H = 2$ см.

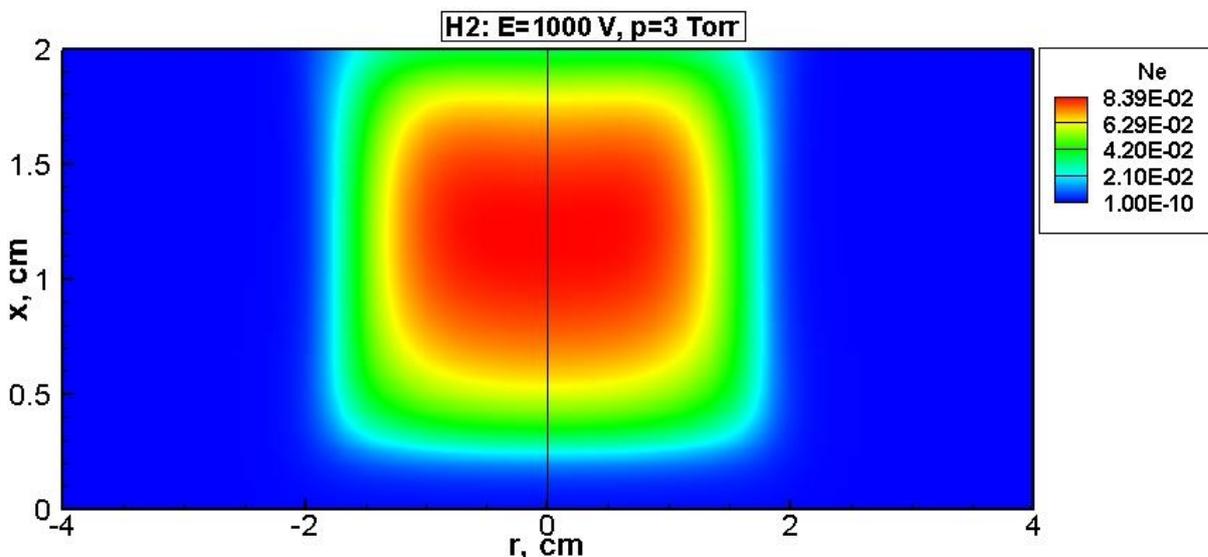


Рис. 46 Пространственные распределения концентрации электронов $p = 3$ Торр, $E = 1$ кВ, $\gamma = 0.33$, $H = 2$ см.

Результаты численного моделирования двухмерной структуры тлеющего разряда при давлениях $p = 3$ and $p = 10$ Торр приведены на Рис. 45 - Рис. 46 и Рис. 48 - Рис. 51. При увеличении давления радиальные размеры положительного столба тлеющего разряда сильно увеличиваются. Также растет плотность тока и

концентрация заряженных частиц на оси симметрии тлеющего разряда.

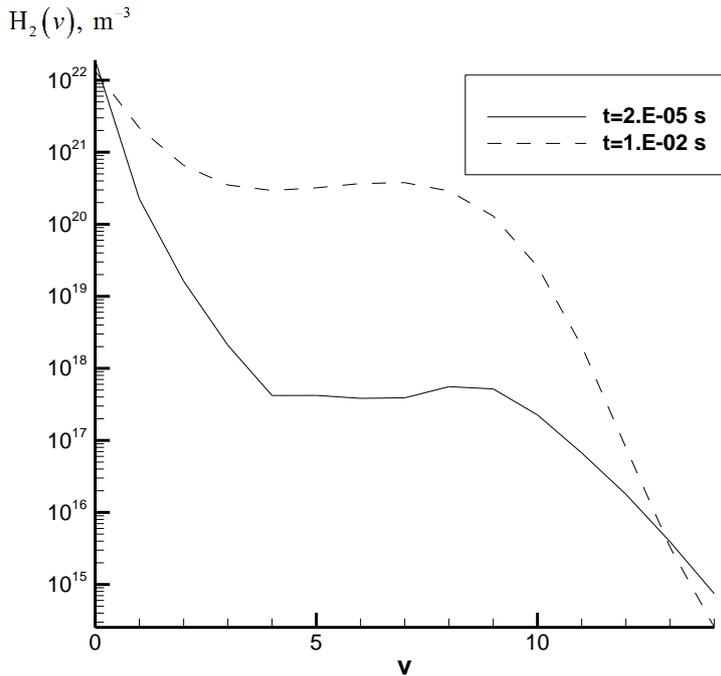


Рис. 47 Колебательная функция распределения (зависимость концентрации колебательно возбужденных молекул от колебательного квантового числа).

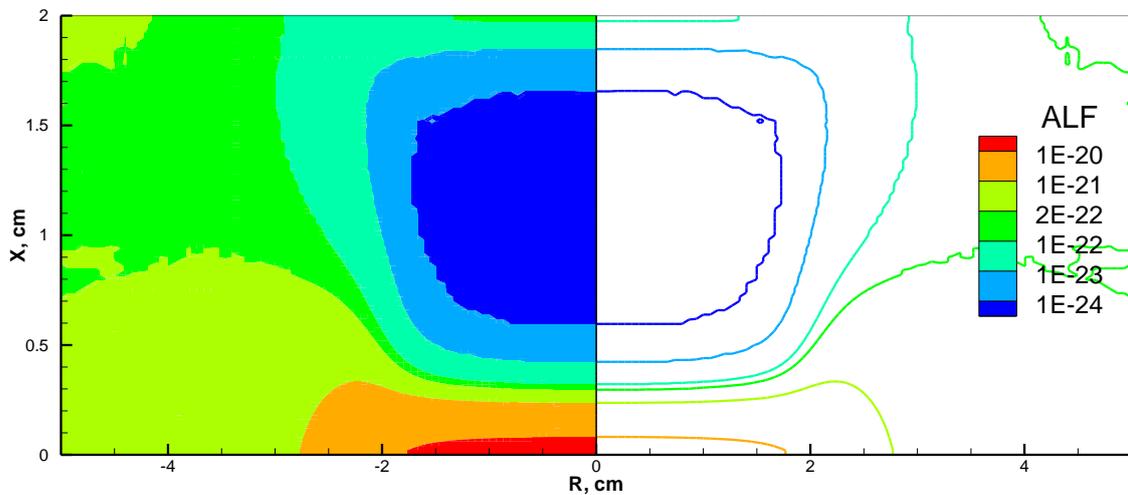


Рис. 48 Пространственное распределение 1го коэффициента Таунседа (α/N) в m^2 .

На Рис. 47 и Рис. 48 представлены результаты расчета 1го коэффициента таунседа (коэффициент ионизации), коэффициента диффузии рассчитанных на основе решения кинетического уравнения Больцмана, а также дано колебательное распределение молекул водорода в положительном столбе

тлеющего разряда. На рисунках видно, что коэффициент ионизации на несколько порядков выше в области катодного слоя, по сравнению с положительным столбом тлеющего разряда. Функция распределения электронов по энергиям является немаксвелловской, а распределение молекул по колебательным состояниям не больцмановское. Пространственное распределение кинетических параметров плазмы, рассчитанных с использованием решения кинетического уравнения Больцмана, а также распределение химических компонент плазмы даны на Рис. 49 - Рис. 55.

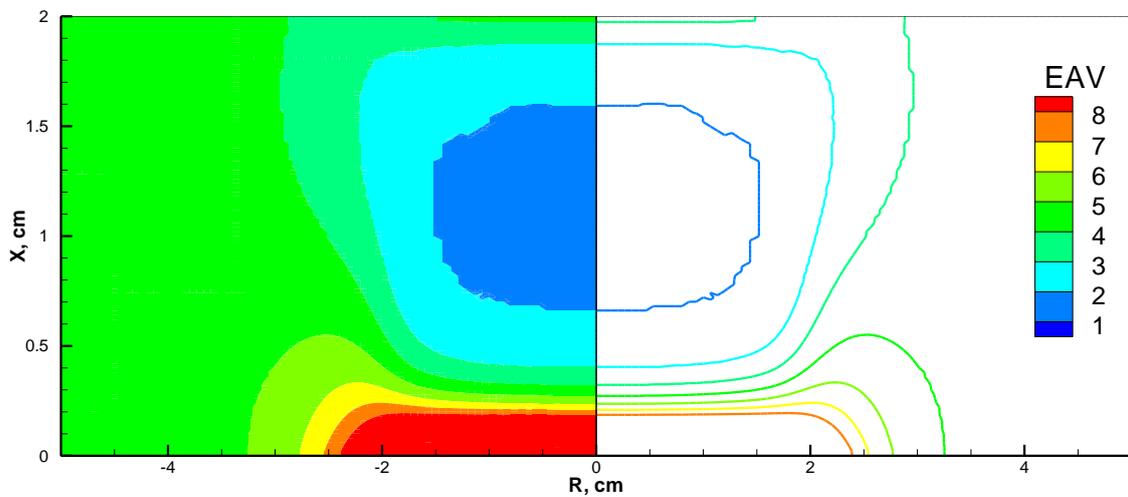


Рис. 49 Пространственное распределение средней энергии электронов (eV).

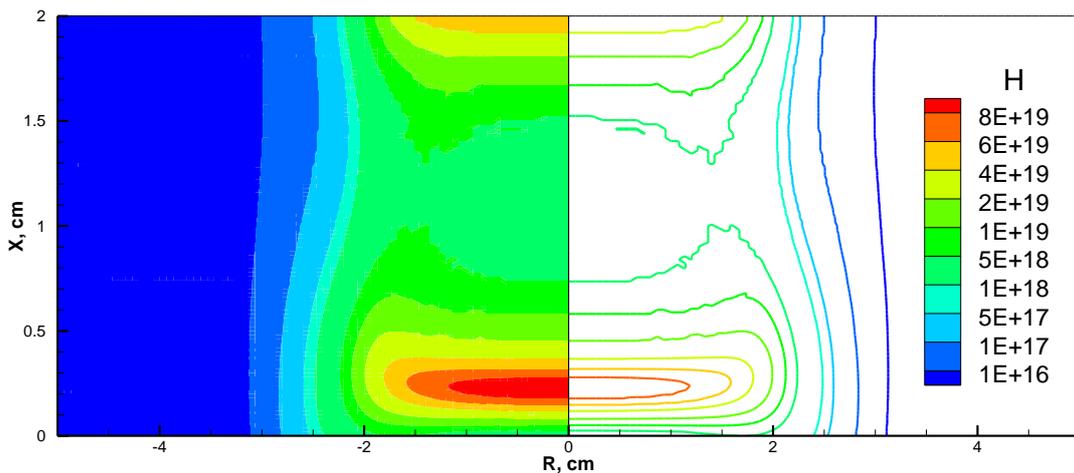


Рис. 50 Пространственное распределение концентрации нейтральных атомов Н (m^{-3}).

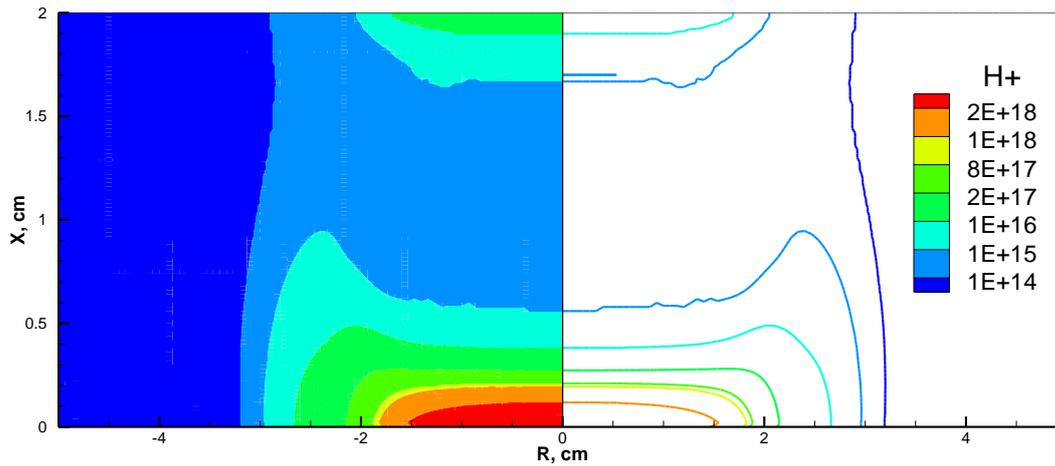


Рис. 51 Пространственное распределение концентрации атомарных ионов H^+ (M^{-3}).

На данных рисунках показано, что степень диссоциации равна $\delta_{ioniz} = 10^{-7} - 10^{-6}$ в положительном столбе тлеющего разряда и $\delta_{ioniz} = 10^{-4}$ катодном слое. Основным ионом в плазме является N_2^+ . Степень диссоциации равна $\delta_{dissoc} \approx 10^{-3}$. Концентрация колебательно возбужденных молекул с колебательным квантовым числом ($\nu \geq 5$) на порядок выше, чем концентрация в положительном столбе (Рис. 55). На Рис. 52 и Рис. 53 показано влияние различных механизмов, рассматриваемых в работе на образование нейтральных атомов N , атомарных N^+ ионов. Данные рисунки также иллюстрируют влияние колебательного возбуждения молекул на образование данных компонент. Результаты численного моделирования, приведенные на данных графиках, получены для значений приведенного электрического поля, характерных для положительного столба тлеющего разряда ($E/N \approx 70 \text{ Td}$). Основным механизмом образования молекулярного иона N_2^+ является ионизация электронным ударом. 85% всех молекулярных ионов в плазме тлеющего разряда образовались из основного колебательного состояния, 9% с 1го возбужденного, и 6% с более высоких колебательных уровней. Основным механизмом образования атомарных ионов является ионизация нейтрального атома электронным ударом.

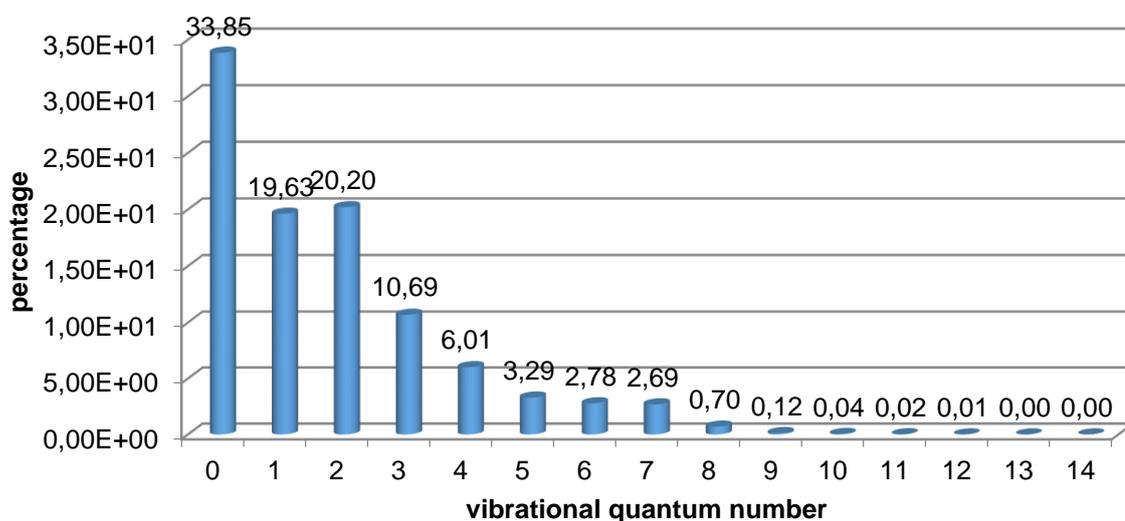


Рис. 52 Доля атомарных ионов H образовавшихся из разных колебательных состояний в реакции $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow H(1s) + H(2l) + e$.

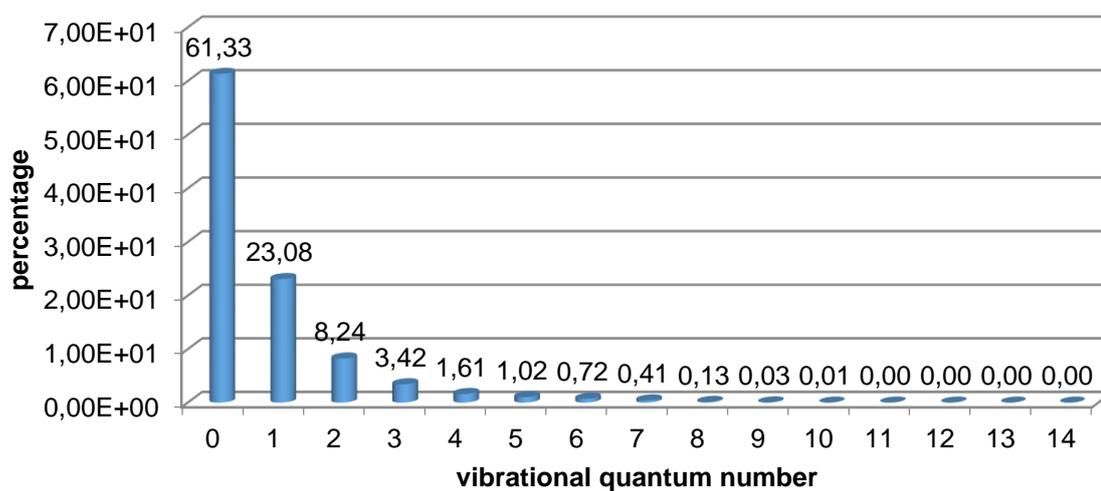


Рис. 53 Доля атомарных ионов H^+ образовавшихся из разных колебательных состояний в реакции $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(X^2\Sigma_g^+) + 2e \rightarrow H(1s) + H^+ + 2e$.

Основным процессом, ответственным за образование нейтральных атомов водорода, является диссоциация молекулы электронным ударом, протекающая через возбуждение электронного уровня $b^3\Sigma_u^+$. Стоит также отметить, что 18% нейтральных атомов, образуется в реакциях с колебательно-возбужденными молекулами водорода.

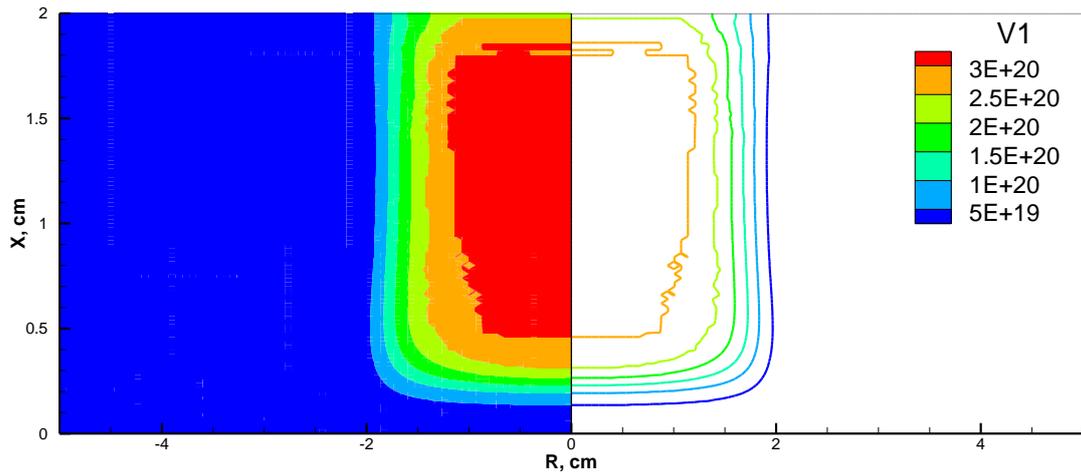


Рис. 54 Пространственное распределение концентрации колебательно возбужденных молекул H_2 для $\nu=1$ (m^{-3}).

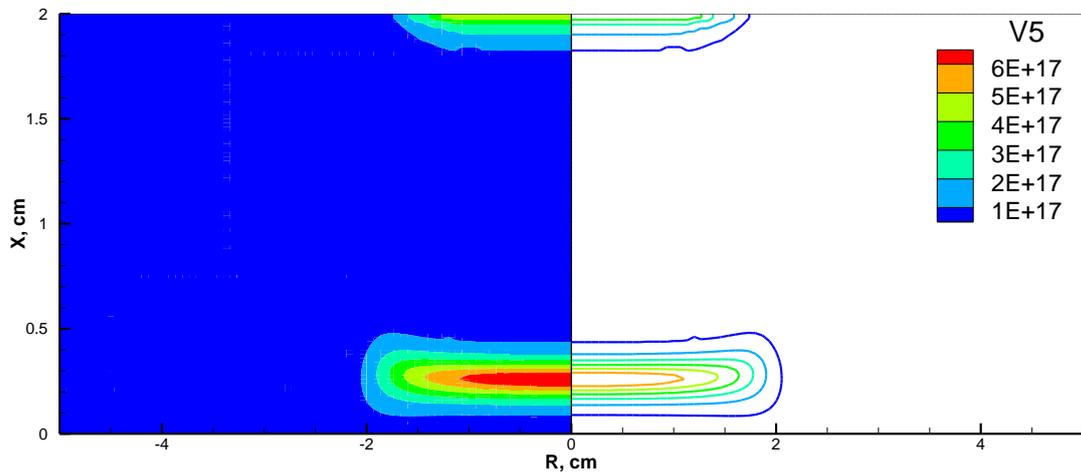


Рис. 55 Пространственное распределение концентрации колебательно возбужденных молекул H_2 для $\nu=5$ (m^{-3}).

4.3. Численное моделирование электродинамической структуры пеннинговского разряда в молекулярном водороде

Уравнения модифицированной диффузионно-дрейфовой модели (МДДМ) базируются на классической диффузионно-дрейфовой модели формулируются на основе уравнений неразрывности для концентраций электронов n_e и

положительных ионов n_i , а так же для потенциала энергетического поля φ , который определяет вектор напряженности электрического поля $\mathbf{E} = -\text{grad}\varphi$

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \frac{\partial \Gamma_{e,x}}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial r \Gamma_{e,r}}{\partial r} = \alpha(E) |\Gamma_e| - \beta n_i n_e, \quad (74)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \frac{\partial \Gamma_{i,x}}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial r \Gamma_{i,r}}{\partial r} = \alpha(E) |\Gamma_e| - \beta n_i n_e, \quad (75)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial \varphi}{\partial r} = 4\pi e (n_e - n_i), \quad (76)$$

где

$$\Gamma_e = -D_e \text{grad} n_e - n_e \mu_e \mathbf{E}, \quad \Gamma_i = -D_i \text{grad} n_i + n_i \mu_i \mathbf{E}, \quad \mathbf{j} = e(\Gamma_i - \Gamma_e), \quad (77)$$

$\alpha(E)$ и β – коэффициенты ионизации и рекомбинации; Γ_e, Γ_i – плотности потоков электронов и положительных ионов; μ_e, μ_i – подвижности электронов и ионов; D_e, D_i – коэффициенты диффузии электронов и ионов.

При добавлении осевого магнитного поля указанные уравнения модифицируются:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \frac{\partial \Gamma_{e,x}}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial r \Gamma_{e,r}}{\partial r} = \alpha(E) |\Gamma_e| - \beta n_i n_e, \quad (78)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \frac{\partial \Gamma_{i,x}}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial r \Gamma_{i,r}}{\partial r} = \alpha(E) |\Gamma_e| - \beta n_i n_e, \quad (79)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial \varphi}{\partial r} = 4\pi e (n_e - n_i), \quad (80)$$

где

$$\Gamma_{e,x} = -D_e \frac{\partial n_e}{\partial x} - \mu_e n_e E_x, \quad \Gamma_{e,r} = -\frac{D_e}{1+b_e^2} \frac{\partial n_e}{\partial r} - \frac{\mu_e}{1+b_e^2} n_e E_r, \quad \Gamma_{e,\varphi} = -b_e \Gamma_{e,r}, \quad (81)$$

$$\Gamma_{i,x} = -D_i \frac{\partial n_i}{\partial x} + \mu_i n_i E_x, \quad \Gamma_{i,r} = -\frac{D_i}{1+b_i^2} \frac{\partial n_i}{\partial r} + \frac{\mu_e}{1+b_i^2} n_i E_r, \quad \Gamma_{i,\varphi} = -b_i \Gamma_{i,r}, \quad (82)$$

$$b_e = \frac{\mu_e B_x}{c}, \quad b_i = \frac{\mu_i B_x}{c}.$$

Подставляя значения плотностей потоков электронов и ионов в уравнения

непрерывности электронной и ионной жидкостей (78) и (79), получим

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-\mu_e n_e E_x - D_e \frac{\partial n_e}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \left(-\frac{\mu_e}{1+b_e^2} n_e E_r - \frac{D_e}{1+b_e^2} \frac{\partial n_e}{\partial y} \right) = \alpha |\Gamma_e| - \beta n_e n_i, \quad (83)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_i n_i E_x - \frac{D_i}{1+b_i^2} \frac{\partial n_i}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \left(\frac{\mu_i}{1+b_i^2} n_i E_r - \frac{D_i}{1+b_i^2} \frac{\partial n_i}{\partial y} \right) = \alpha |\Gamma_e| - \beta n_e n_i, \quad (84)$$

$$\text{где } |\Gamma_e| = \sqrt{\Gamma_{e,x}^2 + \Gamma_{e,r}^2 + \Gamma_{e,\varphi}^2}. \quad (85)$$

Заметим, что введенные коэффициенты b_e и b_i , которые в модели (81) и (82), учитывающие влияние магнитного поля

$$b_e = \frac{\mu_e B_z}{c} = \frac{\omega_e}{\nu_e}, \quad b_i = \frac{\mu_i B_z}{c} = \frac{\omega_i}{\nu_{in}}, \quad (86)$$

хорошо известны в физике плазмы и называются параметрами Холла электронной и ионной жидкостей.

Коэффициенты $\omega_e = eB_z/m_e c$ и $\omega_i = eB_z/m_i c$ в (86) являются ларморовскими частотами вращения электронов и ионов в магнитном поле.

Граничные условия для определения концентраций ионов и электронов, а также электрического потенциала формулируются в следующем виде:

$$x=0, \quad r \in [0, R_c]: \quad \frac{\partial n_i}{\partial y} = 0, \quad \Gamma_e = \gamma \Gamma_i, \quad \varphi = 0, \quad (87)$$

$$x=H: \quad r \in [R_{AC_i}, R_{AC_e}]: \quad \frac{\partial n_i}{\partial y} = 0, \quad \Gamma_e = \gamma \Gamma_i, \quad \varphi = 0, \quad (88)$$

$$x=H: \quad r < R_{AC_i}: \quad \frac{\partial n_i}{\partial y} = \frac{\partial n_e}{\partial y} = 0, \quad \varphi = 0, \quad (89)$$

$$r=0, \quad \frac{\partial n_e}{\partial x} = \frac{\partial n_i}{\partial x} = \frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0, \quad (90)$$

$$r=R, \quad x < X_{A_1}: \quad \frac{\partial n_e}{\partial x} = \frac{\partial n_i}{\partial x} = \frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0, \quad (91)$$

$$r=R, \quad X_{A_1} < x < X_{A_2}: \quad \frac{\partial n_e}{\partial x} = 0, \quad n_i = 0, \quad \varphi = V, \quad (92)$$

$$r=R, \quad x > X_{A_2}: \quad \frac{\partial n_e}{\partial x} = \frac{\partial n_i}{\partial x} = \frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0. \quad (93)$$

В рассматриваемой постановке задачи некоторые граничные условия должны корректироваться для учета более сложной геометрии реальной разрядной камеры.

В первую очередь это относится к условиям (89), в области т.н. «мениска» газоразрядной камеры. Требуют своего уточнения условия (91) и (92).

Грубые начальные условия могут привести не только к существенному замедлению численной процедуры отыскания решения, но также к его расходимости. Поэтому даже при аналитическом задании начальных приближений желательно использовать разумные значения концентраций заряженных частиц и правильную конфигурацию всего разряда. Очевидно, что решение задачи существенно ускоряется, если для расчета новых вариантов использовать предварительно полученные решения.

В классической диффузионно-дрейфовой модели без учета нагрева газа используются следующие традиционные замыкающие соотношения:

$$\mu_e(p) = \frac{4.2 \times 10^5}{p}, \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с}) \quad (94)$$

$$\mu_i(p) = \frac{2280}{p}, \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с}) \quad (95)$$

$$D_e = \mu_e(p) T_e, \text{ см}^2/\text{с} \quad (96)$$

$$D_i = \mu_i(p) T, \text{ см}^2/\text{с} \quad (97)$$

где p – давление в тлеющем разряде.

Коэффициент ион-электронной рекомбинации и температура электронов приняты постоянными:

$$\beta = 2 \times 10^{-7} \text{ см}^3/\text{с}, T_e = 11610 \text{ К}. \quad (98)$$

Коэффициент ионизации (так называемый 1-й коэффициент Таунсенда) задается в виде

$$\alpha(E) = pA \exp \left[-\frac{B}{(|E|/p)} \right], \text{ см}^{-1}, \quad (99)$$

$$\text{где для молекулярного азота } A = 12 \frac{I}{\text{см} \cdot \text{торр}}, B = 342 \frac{V}{\text{см} \cdot \text{торр}} \quad (100)$$

$$\text{где для молекулярного водорода } A = 5 \frac{I}{\text{см} \cdot \text{торр}}, B = 130 \frac{V}{\text{см} \cdot \text{торр}}. \quad (101)$$

Аппроксимационные коэффициенты в первой формуле Таунсенда справедливы в диапазоне приведенных полей $\frac{E}{p} \in [100, 600]$ В/(см·торр) для молекулярного азота и в диапазоне приведенных полей $\frac{E}{p} \in [150, 600]$ В/(см·торр) для молекулярного водорода.

Уравнения решаются совместно с уравнением внешней электрической цепи, которое для постоянного тока имеет вид

$$E = V + IR_0,$$

где V – падение напряжения на электродах; I – полный ток через разрядный промежуток; E – ЭДС источника питания; R_0 – сопротивление внешней цепи.

Попытка применения диффузионно-дрейфовой модели в условиях, реализуемых в типичных газо-наполненных нейтронных трубках (см., например, [129]) наталкивается на принципиальные проблемы, связанные, вообще говоря, с нарушением условий применимости диффузионно-дрейфовых моделей при низких давлениях (порядка 1 мторр). В модифицированной диффузионно-дрейфовой модели вводятся новые функциональные зависимости для подвижностей ионов и электронов, а также новая функциональная зависимость для скорости ионизации в правой части уравнений (83), (84).

Учитывая, что скорость дрейфа ионов при больших приведенных полях может быть представлена в виде [130]

$$V_{dr,i} = \left(\frac{M_i}{M}\right)^{1/4} \left(1 + \frac{M_i}{M}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{eEl}{M_i}}, \quad (102)$$

где l - длина свободного пробега, M_i , M - масса иона и молекул фонового газа.

Переформулировка соотношения (102) показывает, что наблюдается коренная зависимость скорости дрейфа ионов от приведенного электрического поля

$$V_{dr,i} = 9.2 \cdot 10^4 \sqrt{\frac{E_V}{p_{Torr}}} \text{ см/с}, \quad (103)$$

(размерности указаны в нижних индексах напряженности поля и давления)

Однако, как известно, в пределе слабых полей

$$V_{dr,H_2^+} = (\mu_i p_{Torr})_{H_2^+} \frac{E_V}{p_{Torr}} \quad (104)$$

Если для больших приведенных полей формально оставить прежнюю функциональную зависимость

$$V_{dr,i} = \mu_i \mathbf{E},$$

то окажется, что подвижность зависит нелинейно от поля:

$$\mu_i p_{Torr} = 9.2 \cdot 10^4 \sqrt{\frac{p_{Torr}}{E_V}} \quad (105)$$

Для совмещения двух предельных режимов подвижностей в расчетах используется эффективная подвижность:

$$\mu_{i,eff} = \min \left\{ \frac{\mu_i p}{p}, \frac{9.2 \cdot 10^4}{\sqrt{p_{Torr} E_V}} \right\} \quad (106)$$

и

$$V_i = \mu_{i,eff} E_V \quad (107)$$

Соответственно, для коэффициентов диффузии:

$$D_{i,eff} = \mu_{i,eff} T_i \quad (108)$$

По аналогии задаются соотношения для электронов:

$$\mu_{e,eff} = \min \left\{ \frac{\mu_e p}{p}, \frac{2.4 \cdot 10^6}{\sqrt{p_{Torr} E_V}} \right\} \quad (109)$$

и

$$V_e = \mu_{e,eff} E_V \quad (110)$$

Соответственно, для коэффициентов диффузии:

$$D_{e,eff} = \mu_{e,eff} T_e \quad (111)$$

Теперь рассмотрим соотношения для расчета коэффициента ионизации в относительно малых и предельно больших (для данного типа разряда) приведенных полях.

В приближении малых полей

$$\alpha_e = p_{Torr} A_{I/cm-Torr} \exp \left[- \frac{B_V / (cm \cdot Torr)}{E_V / p_{Torr}} \right] \quad (112)$$

В приближении больших полей

$$\alpha_e = N_n \sigma_i, \quad (113)$$

причем сечение ионизации рассчитывается по формуле Томсона

$$\sigma_i = 4\pi a_0^2 \left(\frac{I_H}{\varepsilon} \right) \frac{\varepsilon - I}{I}, \text{ см}^2 \quad (114)$$

Заметим, что при использовании формулы (111) можно учитывать связь энергии со скоростью

$$\varepsilon_{e,[eV]} = 2.84 \cdot 10^{-14} V_{e[cm/s]}^2 \quad (115)$$

Также полезно аналогичное соотношение для тяжелых частиц:

$$\varepsilon_{i,[eV]} = 1.05 \cdot 10^{-12} V_{A[cm/s]}^2, \quad (50)$$

где А – атомная масса тяжелых частиц.

С целью более подробного анализа процессов ионизации в рассматриваемом разряде Пеннинга рассчитываются поля и коэффициенты ионизации соответствующие движениям зарядов вдоль координатных направлений (x, r, φ). Энергия электронов по координатным направлениям:

$$E_{e,x} = 2.855 \times 10^{-16} V_{e,x}^2 + T_{e,eV}, \text{ эВ} \quad (116)$$

$$E_{e,r} = 2.855 \times 10^{-16} V_{e,r}^2 + T_{e,eV}, \text{ эВ} \quad (117)$$

$$E_{e,\varphi} = 2.855 \times 10^{-16} V_{e,\varphi}^2 + T_{e,eV}, \text{ эВ}, \quad (118)$$

где $T_{e,eV}$ - энергия теплового движения электронов.

В расчетах скорости ионизации используются два соотношения.

При $E_{e,x} > I_{H_2}$, где I_{H_2} потенциал ионизации молекулярного водорода:

$$\alpha_e = N_n \sigma_i, \quad (119)$$

где

$$\sigma_i = 3.52 \times 10^{-16} \left(\frac{I_{H_2}}{E_{e,x}} \right) \left(\frac{E_{e,x} - I_{H_2}}{I_{H_2}} \right). \quad (120)$$

При $E_{e,x} < I_{H_2}$ коэффициент ионизации рассчитывается по формуле (99).

В расчет был включен вклад ионов в ионизацию нейтрального газа:

$$\alpha_i = 3.52 \times 10^{-16} N_n. \quad (121)$$

Теперь, учитывая соотношения для слабых и сильных приведенных полей плотности потоков электронов в продольном магнитном поле приобретут следующий вид:

$$\Gamma_{e,x} = -D_{e,eff} \frac{\partial n_e}{\partial x} - \mu_{e,eff} n_e E_x, \quad \Gamma_{e,r} = -\frac{D_{e,eff}}{1+b_{e,eff}^2} \frac{\partial n_e}{\partial r} - \frac{\mu_{e,eff}}{1+b_{e,eff}^2} n_e E_r, \quad (122)$$

$$\Gamma_{e,\varphi} = -b_{e,eff} \Gamma_{e,r}, \quad b_{e,eff} = \frac{\mu_{e,eff} B_x}{c}. \quad (123)$$

Аналогично для ионов:

$$\Gamma_{i,x} = -D_{i,eff} \frac{\partial n_i}{\partial x} + \mu_{i,eff} n_i E_x, \quad \Gamma_{i,r} = -\frac{D_{i,eff}}{1+b_{i,eff}^2} \frac{\partial n_i}{\partial r} + \frac{\mu_{i,eff}}{1+b_{i,eff}^2} n_i E_r, \quad (124)$$

$$\Gamma_{i,\varphi} = -b_{i,eff} \Gamma_{i,r}, \quad b_{i,eff} = \frac{\mu_{i,eff} B_x}{c}. \quad (125)$$

Результаты численного моделирования

Расчеты проводились для следующих исходных данных:

газ – H₂; давление p=1.2 мторр; E = 2.5 кВ; R₀ = 3 кОм; γ = 0.33; B_x = 0.1 Т,

R_C = R_{AC_e} = 0.55 см, R_{AC_i} = 0.4 см, X_{A1} = 0.3 см, X_{A2} = 0.8 см, X_C = 1.1 см, L = X_C

= 1.1 см (пространственный масштаб задачи). Сначала структура пеннинговского

разряда рассчитывалась с использованием методики, описанной в предыдущем разделе, затем на основе расчетных данных по электрическому полю и концентрации электронов проводилось численное моделирование компонентного состава плазмы пеннинговского разряда. Стоит отметить, что данная методика носит приближенный характер, т.к. математические модели разделов 3.2 и 4.3 не являются полностью самосогласованными, и тем самым не учитывают обратное влияние заряженных частиц (концентрация которых получена с использованием подробной кинетической схемы из раздела 3.2) на распределение потенциала электрического поля, потери энергии электронов на возбуждение, ионизацию и диссоциацию молекул и атомов водорода.

На Рис. 56 и Рис. 59 представлены поля концентраций электронов и ионов в электроразрядной камере. Главная особенность представленных распределений состоит в концентрации заряженных частиц в продольном направлении.

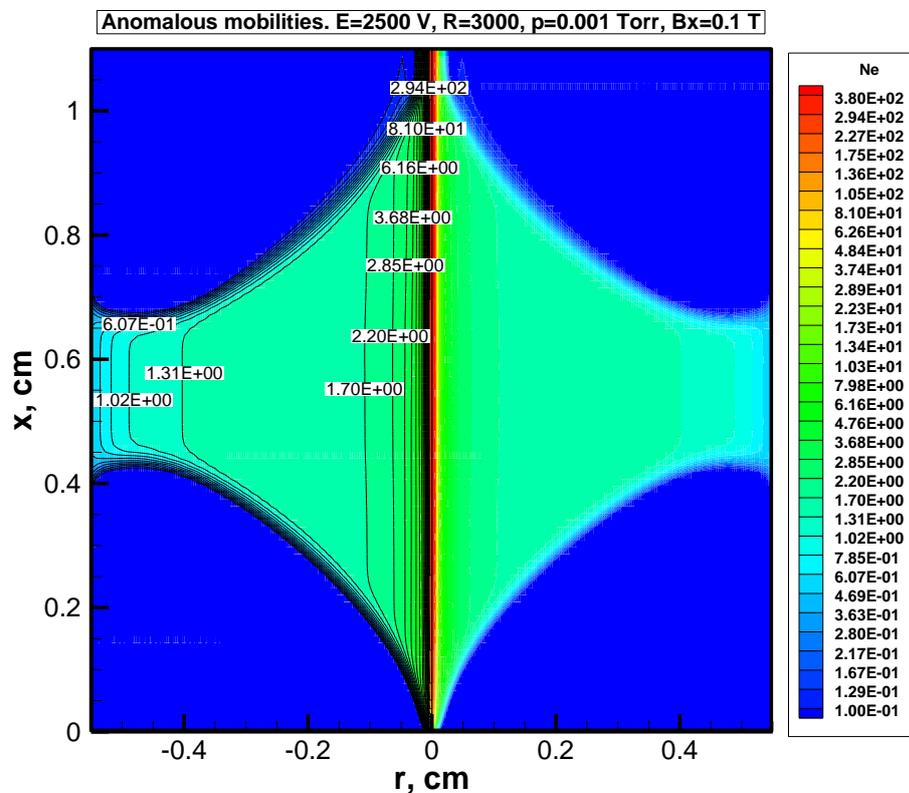


Рис. 56 Концентрация электронов (отнесена к 10^{10} см^{-3})

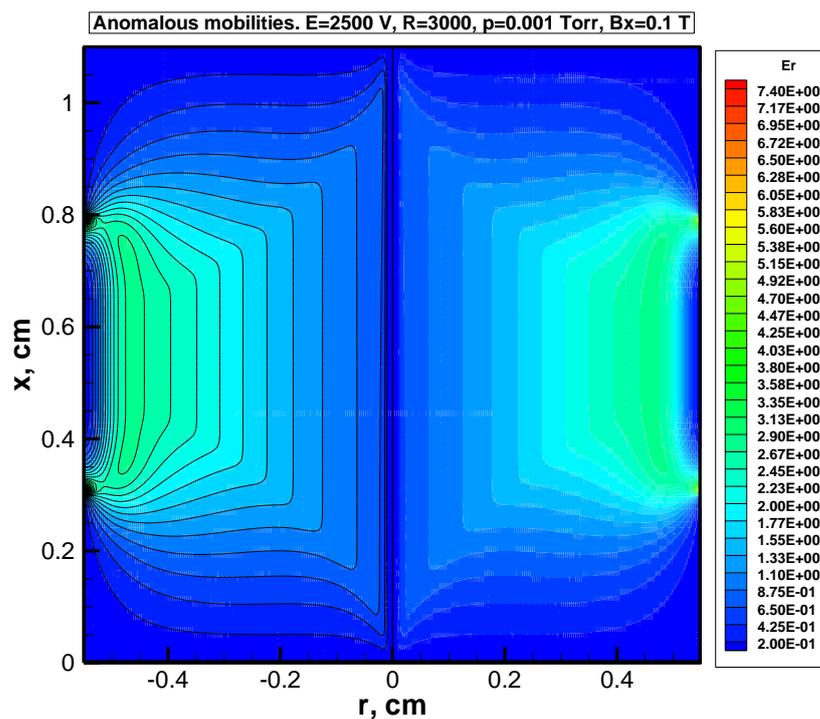


Рис. 58 Радиальная проекция напряженности электрического поля $\tilde{E}_r = E_r / (E/L)$

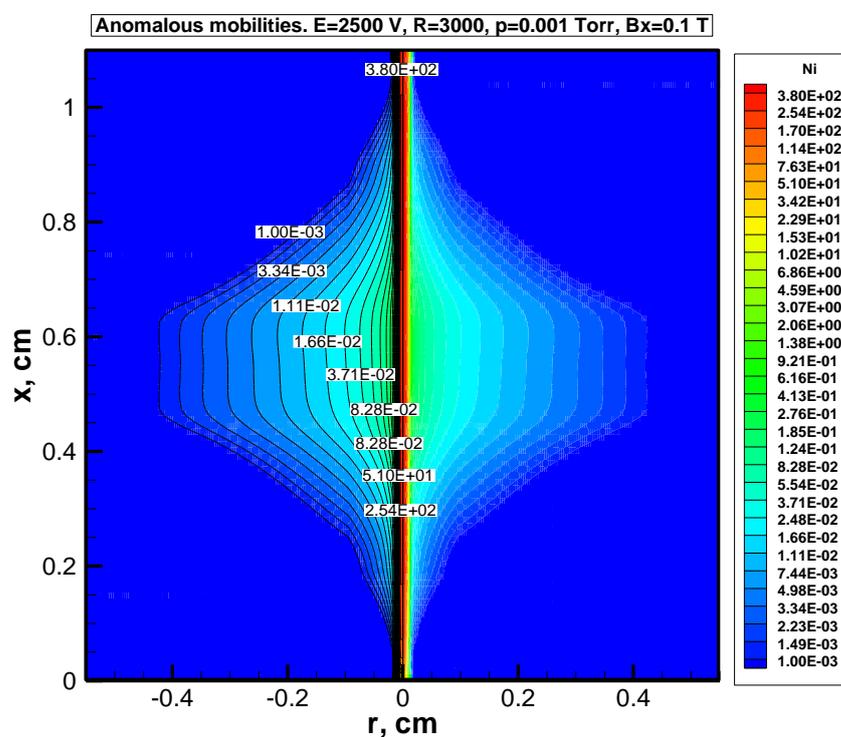


Рис. 59 Концентрация ионов (отнесена к 10^{10} см^{-3})

Аналогичные данные приведены на рис. 104, где показано распределение

приведенного электрического поля $|E|/p$. На этом рисунке отчетливо видны области с максимальным приведенным полем (вблизи границ анода) и области с наименьшим приведенным электрическим полем вблизи оси симметрии, у поверхности анода и в приосевых областях у катода и анти-катода.

На рис. Рис. 57 и Рис. 58 показана напряженность электрического поля вдоль осевой и радиальной координат. Как и следовало ожидать, локальное возрастание осевого и радиального электрического поля наблюдается у границы анода. Несмотря на локальные неоднородности напряженности электрического поля у границ анода, в отличие от того, что наблюдается в тлеющем разряде при относительно высоких давлениях (от 1 торр и выше), скорость ионизации в этих областях оказывается не самой большой. На Рис. 60 и Рис. 61 показана скорость ионизации электронным ударом, рассчитанная с использованием осредненных потоков электронов в осевом направлении оси симметрии $\dot{w}_{e,x}$ и в азимутальном направлении $\dot{w}_{e,\varphi}$. Видно, что основным источником ионизации являются осевые потоки электронов вблизи оси симметрии газоразрядной камеры. Несколько удивительным оказался заметный вклад в скорость ионизации осевых потоков ионов в приосевых областях разряда (рис. 109-110). Вклад ионных потоков в радиальном и азимутальном направлении оказывается не столь значимым. Тем не менее следует отметить, что азимутальное движение ионов и электронов является заметным источником ионизации. (Следует иметь в виду, что здесь речь идет об усредненных движениях, которые рассматриваются в диффузионно-дрейфовой модели. При кинетическом рассмотрении движение электронной и ионной компоненты газоразрядной плазмы является более сложным).

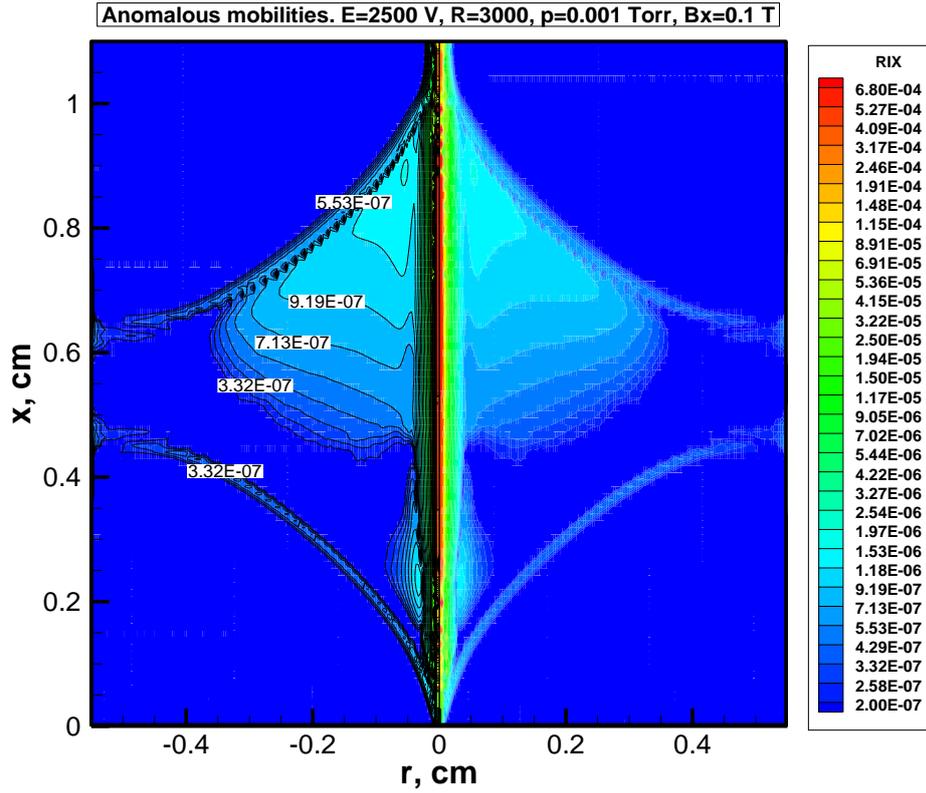


Рис. 60 Скорость ионизации ионным ударом $\dot{\omega}_{i,x}$ обусловленная движением частиц в осевом направлении.

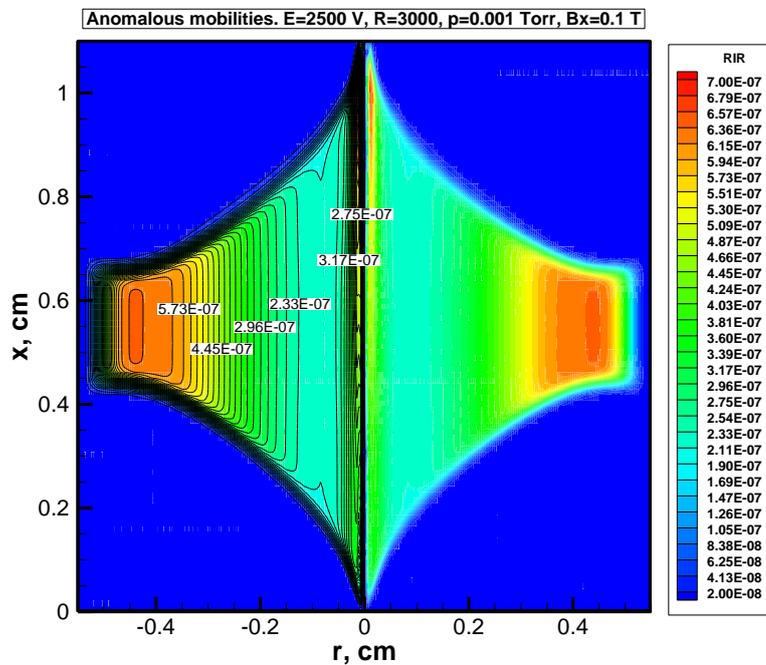


Рис. 61 Скорость ионизации ионным ударом $\dot{\omega}_{i,r}$ обусловленная движением частиц в радиальном направлении.

Результаты численного моделирования компонентного состава плазмы пеннинговского разряда в двухмерной геометрии с использованием кинетической схемы, описанной в разделе 3.2., показаны на Рис. 62 и Рис. 63. Расчеты проводились с максвелловской и немасвелловской (с учетом наличия моноэнергетических электронов) функцией распределения электронов. По причине относительно высоких энергий электронов в плазме пеннинговского разряда расчеты с учетом наличия моноэнергетических электронов мало отличаются от расчетов с учетом наличия только максвелловских электронов. На Рис. 62 даны пространственные распределения концентрации нейтральных атомов водорода. На рисунке видно, что степень диссоциации в основном объеме плазмы пеннинговского разряда составляет около $\sim 2\%$. Пространственные распределения концентрации молекулярных ионов водорода показаны на Рис. 63. На данных рисунках видно, что степень ионизации равна ~ 0.1 . На Рис. 64 и Рис. 65 показано распределение колебательно-возбужденных молекул газа для различных колебательных квантовых чисел. Как и в нуль-мерных расчетах оказывается, что число колебательно возбужденных молекул на 2 порядка ниже, чем концентрация молекул в основном колебательном состоянии. Заметим, что данные результаты численного моделирования являются приближенными и дают оценку сверху для концентрации компонент плазмы пеннинговского разряда, тем не менее, полученные в данной работе результаты дают качественное представление о физико-химических превращениях, протекающих в плазме пеннинговского разряда.

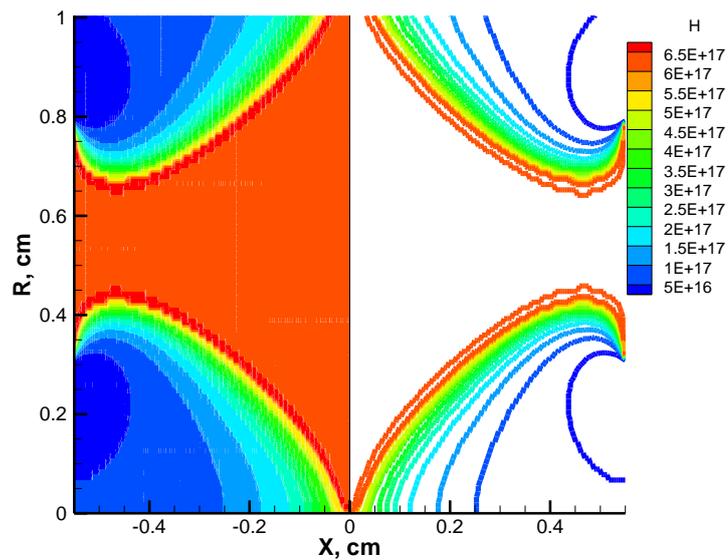


Рис. 62 Пространственное распределение концентрации нейтральных атомов H (m^{-3}).

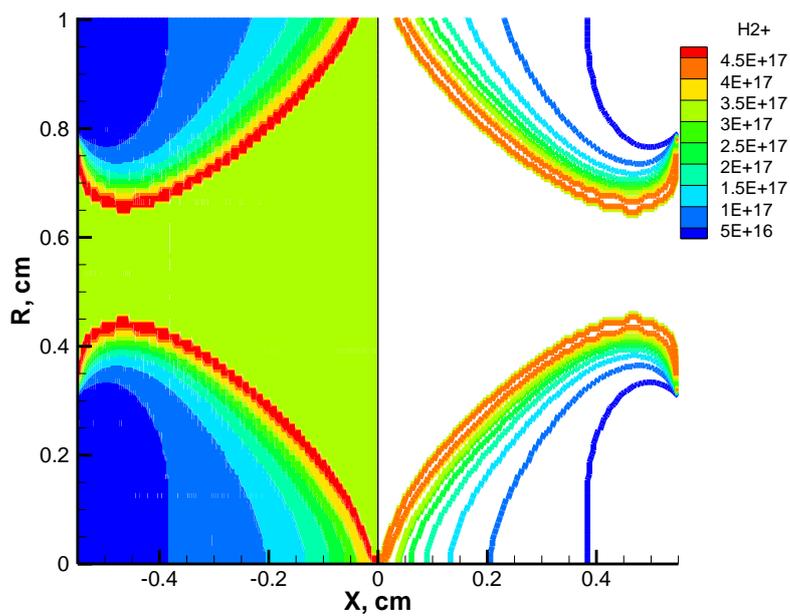


Рис. 63 Пространственное распределение молекулярных ионов H_2^+ (m^{-3}).

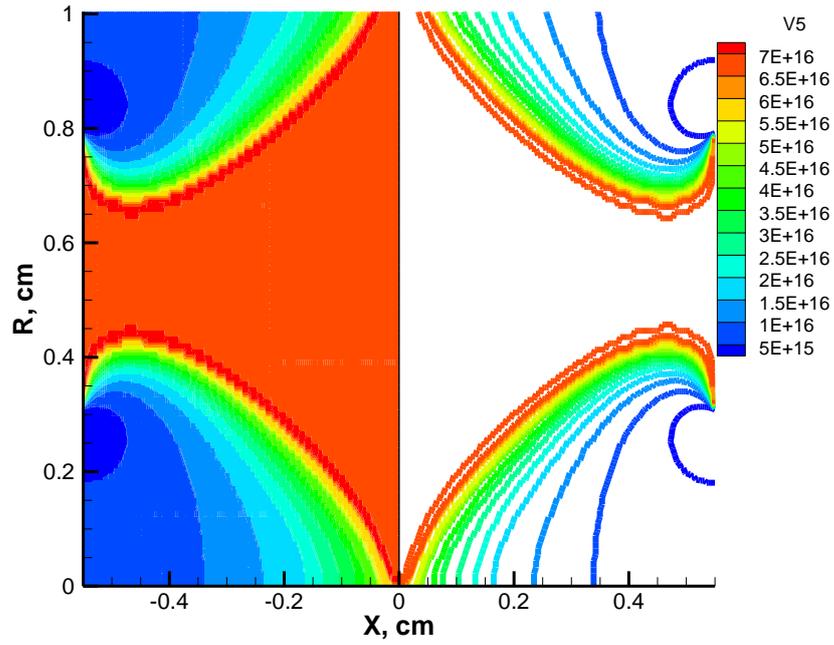


Рис. 64 Пространственное распределение колебательно возбужденных молекул H_2 для $\nu=5$ (m^{-3}).

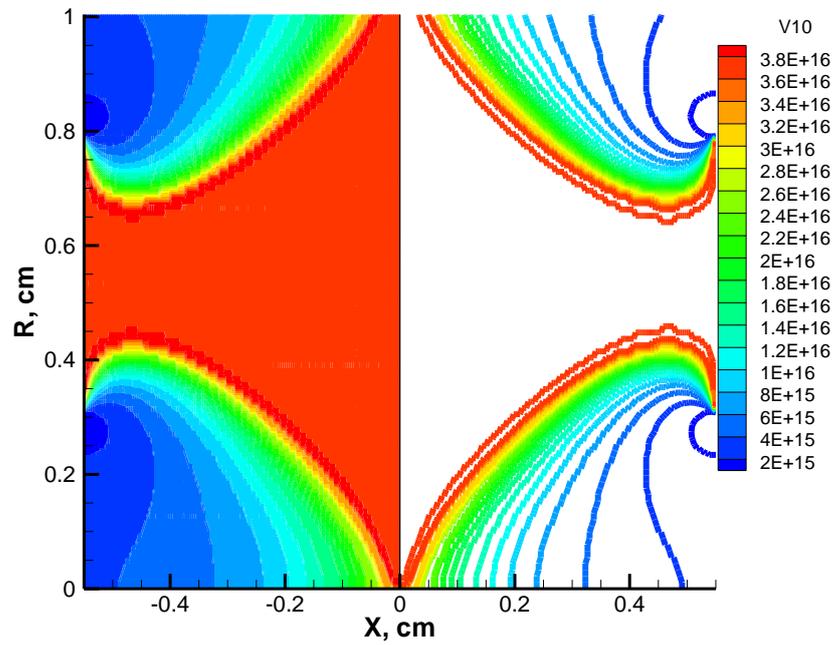


Рис. 65 Пространственное распределение колебательно возбужденных молекул H_2 для $\nu=10$ (m^{-3}).

Глава 5. Численное моделирование истечения струи продуктов сгорания из сопла гиперзвукового прямоточного воздушно-реактивного двигателя (ГПВРД)

5.1. Описание двухмерной (2D) модели струи продуктов сгорания

2D система уравнений Навье-Стокса

В данной главе сформулирована система уравнений движения вязкого теплопроводного химически реагирующего газа. Численное интегрирование уравнений движения выполняется методом установления. На каждом временном итерационном слое интегрируются уравнения Навье-Стокса [131] и уравнение неразрывности, уравнение сохранения энергии и система уравнений диффузии химических компонентов смеси, и система уравнений колебательной кинетики [132]. Уравнения движения, физической и химической кинетики формулируются в двумерной осесимметричной постановке:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial r} + \frac{\partial G}{\partial z} = \frac{\partial E_{\mu}}{\partial r} + \frac{\partial G_{\mu}}{\partial z} + H \quad (126)$$

$$f = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho U^r \\ \rho U^z \end{bmatrix}; \quad E = \begin{bmatrix} \rho U^r \\ \rho U^r U^r + P \\ \rho U^z U^r \end{bmatrix}; \quad G = \begin{bmatrix} \rho U^z \\ \rho U^r U^z \\ \rho U^z U^z + P \end{bmatrix};$$

$$E_{\mu} = \begin{bmatrix} 0 \\ 2\mu \frac{\partial U^r}{\partial r} - \frac{2}{3} \mu \operatorname{div}(U) \\ \mu \left(\frac{\partial U^z}{\partial r} + \frac{\partial U^r}{\partial z} \right) \end{bmatrix}; \quad G_{\mu} = \begin{bmatrix} 0 \\ \mu \left(\frac{\partial U^z}{\partial r} + \frac{\partial U^r}{\partial z} \right) \\ 2\mu \left(\frac{\partial v^z}{\partial z} \right) - \frac{2}{3} \mu \operatorname{div}(U) \end{bmatrix};$$

$$H = \begin{bmatrix} -\frac{\rho U^r}{r} \\ 2\mu \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{U^r}{r} \right) \right) - \frac{\rho (U^r)^2}{r} \\ \frac{\mu}{r} \left(\frac{\partial v^z}{\partial r} + \frac{\partial v^r}{\partial z} \right) - \frac{\rho U^z U^r}{r} \end{bmatrix};$$

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \operatorname{div} \rho_i \mathbf{U} = -\operatorname{div} \mathbf{J}_i + \dot{w}_i \quad (127)$$

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p \mathbf{U} \operatorname{grad} T = \operatorname{div} (\lambda \operatorname{grad} T) + \frac{\partial p}{\partial t} + \operatorname{grad} p + \Phi_\mu - \sum_{i=1}^{N_s} h_i \dot{w}_i \quad (128)$$

$$\Phi_\mu = \mu \left(2 \left(\frac{U^r}{r} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial U^r}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial U^z}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial U^r}{\partial z} + \frac{\partial U^z}{\partial r} \right)^2 - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial U^z}{\partial z} + \frac{\partial U^r}{\partial r} + \frac{U^r}{r} \right)^2 \right)$$

- диссипативная функция, t - время; x, r - ортогональные цилиндрические координаты; U^r, U^z - проекции скорости V на оси координат x, r ; p, ρ - давление и плотность; T - температура поступательного движения частиц, μ, λ - динамический коэффициент вязкости и коэффициент теплопроводности; c_p - удельная теплоемкость смеси при постоянном давлении, $c_p = \sum_{i=1}^{N_s} Y_i c_{p,i}$; Y_i - массовая доля i -го компонента смеси; $c_{p,i}, \rho_i, h_i$ - удельная теплоемкость при постоянном давлении, плотность i -го компонента смеси и энтальпия; \dot{w}_i - массовая скорость химических превращений для i -го компонента смеси, D_i - эффективный коэффициент диффузии для i -го компонента смеси; \mathbf{J}_i - вектор плотности диффузионного потока i -го компонента, $\mathbf{J}_i = -D_i \operatorname{grad} Y_i$; N_s - число химических компонентов смеси газов.

Для расчета турбулентных коэффициентов переноса [133] используется алгебраическая модель турбулентного переноса Пеннера-Хасселмана-Эдвардса [134], в соответствии с которой:

$$\mu_t = \frac{1}{2} \rho l^2 \sqrt{\left[\left(\frac{\partial U^z}{\partial r} + \frac{\partial U^r}{\partial z} \right)^2 + 2 \left[\left(\frac{\partial U^r}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\partial U^z}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{U^r}{r} \right)^2 \right] \right]}$$

$$l = K \left(\frac{\sqrt{(U^z)^2 + (U^r)^2}}{\sqrt{B}} + \frac{1}{\sqrt{B} \sqrt{\left[\left(\frac{\partial^2 U^r}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial U^r}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{U^r}{r^2} \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 U^r}{\partial z^2} \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 U^z}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial U^z}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 U^z}{\partial z^2} \right)^2 \right]}} \right)$$

$$B = \left(\frac{\partial U^z}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\partial U^z}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial U^r}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\partial U^r}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{U^r}{r} \right)^2$$

Для того, чтобы определить способ расчета массовой скорости химических превращений \dot{w}_i , для i – го компонента смеси используются базовые понятия химической кинетики. Применяя символическую формулу для n -й химической реакции:

$$\sum_{i=1}^{N_s} a_{j,n} [X_j] = \sum_{i=1}^{N_s} b_{j,n} [X_j]$$

Скорость образования i – й компоненты в n -й химической реакции записывается в виде

$$\begin{aligned} \left(\frac{dX_i}{dt} \right) &= k_{f,n} (b_{i,n} - a_{i,n}) \prod_j^{N_s} X_j^{a_{j,n}} - k_{r,n} (b_{i,n} - a_{i,n}) \prod_j^{N_s} X_j^{a_{j,n}} = \\ &= (b_{i,n} - a_{i,n}) (S_{f,n} - S_{r,n}) \end{aligned}$$

$b_{i,n}$, $a_{i,n}$ - стехиометрические коэффициенты n -й химической реакции; X_i - объемно-молярная концентрация i -й компоненты; $[X_j]$ - химические символы реагентов и продуктов химических реакций; N_r - число химических реакций; $k_{f,n}$, $k_{r,n}$ - константы скоростей прямой и обратной реакций; $S_{f,n}$, $S_{r,n}$ - скорости прямой и обратной реакций.

Тогда скорость образования числа молей i -й компоненты в единице объема определяется следующим образом:

$$W_i = \sum_{n=1}^{N_r} (b_{i,n} - a_{i,n}) (S_{f,n} - S_{r,n})$$

Скорость образования W_i имеет размерность моль/(см³с), поэтому массовая скорость образования i – й компоненты смеси может быть рассчитана таким образом:

$$\dot{w}_i = M_i W_i$$

Где M_i - молекулярный вес i – й компоненты.

Из последних трех соотношений следует, что для вычисления массовой скорости образования i – й компоненты необходимо определить константы скоростей прямых и обратной реакций для каждой из N_r реакций, которые аппроксимируются обобщенной аррениусовской зависимостью:

$$k_{f(r),n} = A_{f(r),n} T^{n_{f(r),n}} \exp\left(-\frac{E_{f(r),n}}{kT}\right)$$

$A_{f(r),n}$, $n_{f(r),n}$, $E_{f(r),n}$ - аппроксимирующие коэффициенты для констант скоростей прямой (f) и обратной (r) реакций.

Константа равновесия для n –й химической реакции определяется следующим образом:

$$k_n = \frac{k_{f,n}}{k_{r,n}},$$

Константа равновесия k_n , и термодинамические свойства индивидуальных химических компонентов аппроксимируются полиномом [135]:

$$G_n = \varphi_{1,n} + \varphi_{1,n} \ln x + \varphi_{3,n} x^{-2} + \varphi_{4,n} x^{-1} + \varphi_{5,n} x + \varphi_{6,n} x^2 + \varphi_{7,n} x^3$$

$$\left(\frac{dG}{dx}\right)_n = (\varphi_{2,n} - \varphi_{3,n} x^{-2} - \varphi_{4,n} x^{-1} + \varphi_{5,n} x + 2\varphi_{6,n} x^2 + 3\varphi_{7,n} x^3) \frac{1}{x}$$

$$\left(\frac{d^2G}{dx^2}\right)_n = (-\varphi_{2,n} + 6\varphi_{3,n} x^{-2} + 2\varphi_{4,n} x^{-1} + 2\varphi_{6,n} x^2 + 6\varphi_{7,n} x^3) \frac{1}{x^2}$$

$$h_n = xT \left(\frac{dG}{dx}\right)_n + \varphi_{8,n} \cdot 10^3, \text{ Дж/моль}$$

$$c_{p,n} = 2x \left(\frac{dG}{dx}\right)_n + x^2 \left(\frac{d^2G}{dx^2}\right)_n, \text{ Дж/моль} \cdot K$$

где $p_0 = 101325$ Па, $x = T \cdot 10^{-4}$.

Заметим, что при температурах в ударном слое выше ~ 10000 К предпочтительнее использовать иную формулировку термодинамической модели, разделив поступательную, электронную, колебательную и

вращательную составляющие полной и внутренней энергии, т.е. применив приближение Борна-Оппенгеймера.

Коэффициенты вязкости и теплопроводности вычисляются по следующим аппроксимирующим соотношениям:

$$\mu = \frac{1}{\sum_{i=1}^{N_c} (Y_i / \mu_i)},$$

$$\lambda_i = \frac{1}{2} \left[\sum_{i=1}^{N_c} x_i \lambda_i + 1 / \sum_{i=1}^{N_c} (x_i / \lambda_i) \right],$$

$$\mu_i = 2.67 \cdot 10^{-5} \frac{\sqrt{M_i T}}{\sigma_i^2 \Omega_i^{(2,2)*}}, \text{ Г/см}\cdot\text{с}$$

$$\lambda_i = 8330 \sqrt{\frac{T}{M_i}} \frac{1}{\sigma_i^2 \Omega_i^{(2,2)*}}, \text{ эрг/см}\cdot\text{К}$$

Где σ_i - эффективный диаметр столкновений, Å ; $\Omega_i^{(2,2)*} = f(T_i)$ - интеграл столкновений, $T_i = kT/\varepsilon_i$, ε_i/k - параметр, характеризующий глубину потенциальной энергии взаимодействия частиц i -го типа; $x_i = p_i/p$ - относительная мольная концентрация.

Эффективный коэффициент диффузии i -го компонента вычисляется по формуле Уилки [136]–[138]:

$$D_i = \frac{1 - x_i}{\sum_{j \neq i}^{N_c} (x_j / D_{i,j})}$$

$$D_{i,j} = 1.858 \cdot 10^{-3} \sqrt{T^3 \frac{M_i + M_j}{M_i M_j}} \frac{1}{p \sigma_{i,j}^2 \Omega_{i,j}^{(1,1)*}}$$

Интегралы столкновений вычисляются по аппроксимациям, предложенным Н.А. Анфимовым [139]:

$$\Omega^{(2,2)*} = 1.157 T_i^{-0.1472}$$

$$\Omega_{i,j}^{(1,1)*} = 1.074 T_{i,j}^{-0.1604}$$

Где функции, определяющие столкновения двух частиц, находятся по комбинаторным формулам [140]:

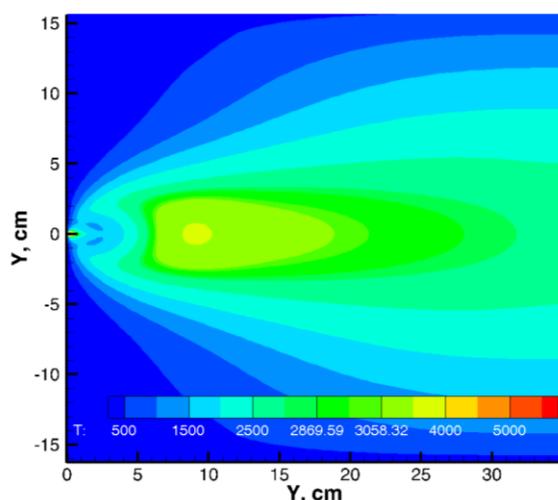
$$T_{i,j} = \frac{kT}{\varepsilon_{i,j}},$$

$$\varepsilon_{i,j} = \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_j},$$

$$\sigma_{i,j} = \frac{1}{2}(\sigma_i + \sigma_j),$$

Численное моделирование струи плазмы

a)



b)

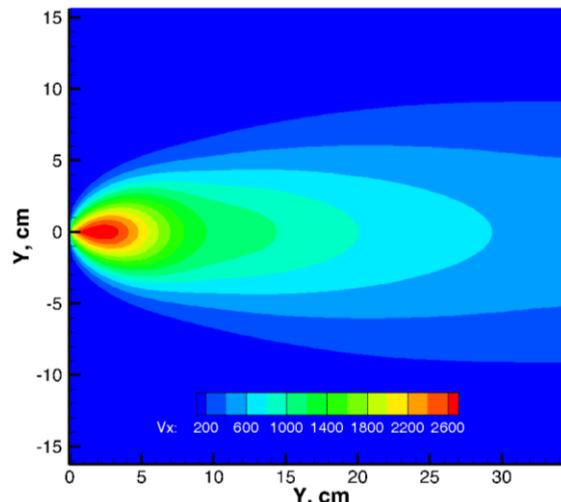


Рис. 66 Пространственные распределения температуры (a) и продольной скорости (b) в струе плазмы.

В данном разделе приводятся предварительные результаты численного моделирования истечения сверхзвуковой струи плазмы в откачанную до 20 Па камеру. В экспериментальной установке в работе [39] для создания струи плазмы использовался многодуговой секционированный плазматрон. Внутри разрядной камеры плазматрона рабочий газ (аргон) имеет температуру $T_e=1$ eV, давление $p=0.1-0.5$ атм. Задача решалась в следующей постановке: считается, что распределение параметров плазмы на выходе сопла постоянно по всей площади сопла, струя (в отличие от [39]) истекает в камеру бесконечной длины. В Табл. 23 приведены исходные данные численного моделирования, полученные на основе данных работы [39].

Табл. 23 Исходные данные численного моделирования.

	Значение на выходе сопла	Значение в камере
Скорость (m/s)	1500	0
Давление (атм)	0.1	2.0E-04
Температура (К)	6000	300

Результаты численного моделирования струи плазмы приведены на Рис. 66.

На Рис. 67 Дано сравнение осевого распределения температуры с экспериментальными данными [39]. Видно удовлетворительное согласие с экспериментом.

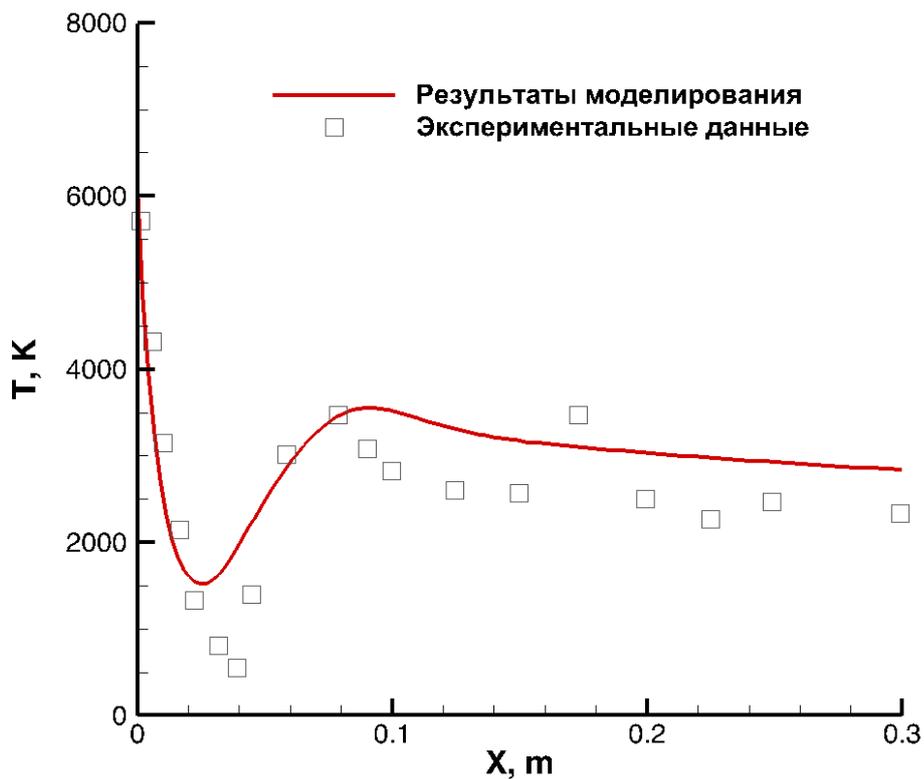


Рис. 67 Сравнение результатов численного моделирования с экспериментальными данными [39].

Предварительные результаты численного моделирования истечения струи продуктов сгорания из сопла ракетного двигателя

В данной главе приводятся результаты численного моделирования истечения струи продуктов сгорания из сопла РН Atlas. Численный расчет стационарных распределений газодинамических параметров в струе проводился на основе решения системы уравнений Навье-Стокса в осесимметричной геометрии с использованием методики, описанной в главе 5.1. Граничные условия, задаваемые на срезе сопла и в спутном потоке, приведены в Табл. 24.

Табл. 24 Значения температуры, давления, скорости, массовых долей химических компонент в спутном потоке и на срезе сопла.

	Спутный поток	Срез сопла
Скорость (m/s)	1476	2960
Давление (Pa)	278	68850
Температура (K)	251	2230
Массовая доля:		
CO ₂	0.000458	0.302262
H ₂ O	0.000000	0.272443
CO	0.000000	0.412135
N ₂	0.766388	0.000000
O ₂	0.233154	0.000028
H ₂	0.000000	0.012194
OH	0.000000	0.000797
O	0.000000	0.000014
H	0.000000	0.000127

В расчете использовалась кинетическая схема, включающая следующие химические реакции:

- 1)* $\text{OH} + \text{H}_2 \leftrightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$
- 2)* $\text{OH} + \text{O} \leftrightarrow \text{H} + \text{O}_2$
- 3)* $\text{H} + \text{H} + \text{M} \leftrightarrow \text{H}_2 + \text{M}$
- 4)* $\text{H} + \text{OH} + \text{M} \leftrightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{M}$
- 5)* $\text{OH} + \text{OH} \leftrightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}$
- 6)* $\text{O} + \text{H}_2 \leftrightarrow \text{OH} + \text{H}$
- 7)* $\text{H} + \text{O} + \text{M} \leftrightarrow \text{OH} + \text{M}$
- 8)* $\text{O} + \text{O} + \text{M} \leftrightarrow \text{O}_2 + \text{M}$
- 9) $\text{CO} + \text{OH} \leftrightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$
- 10) $\text{CO} + \text{O} + \text{M} \leftrightarrow \text{CO}_2 + \text{M}$

Результаты численного моделирования представлены на Рис. 68. и Рис. 69, на которых даны рассчитанные пространственные распределения температуры и давления в струе PH Atlas.

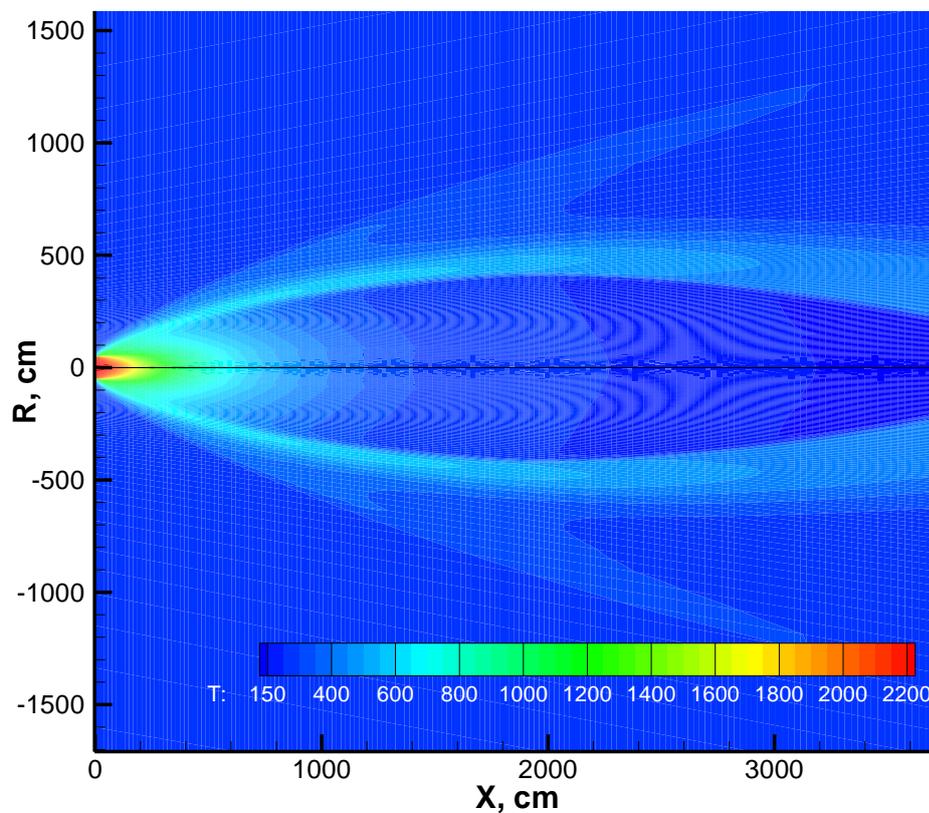


Рис. 68 Распределение температуры в струе PH Atlas.

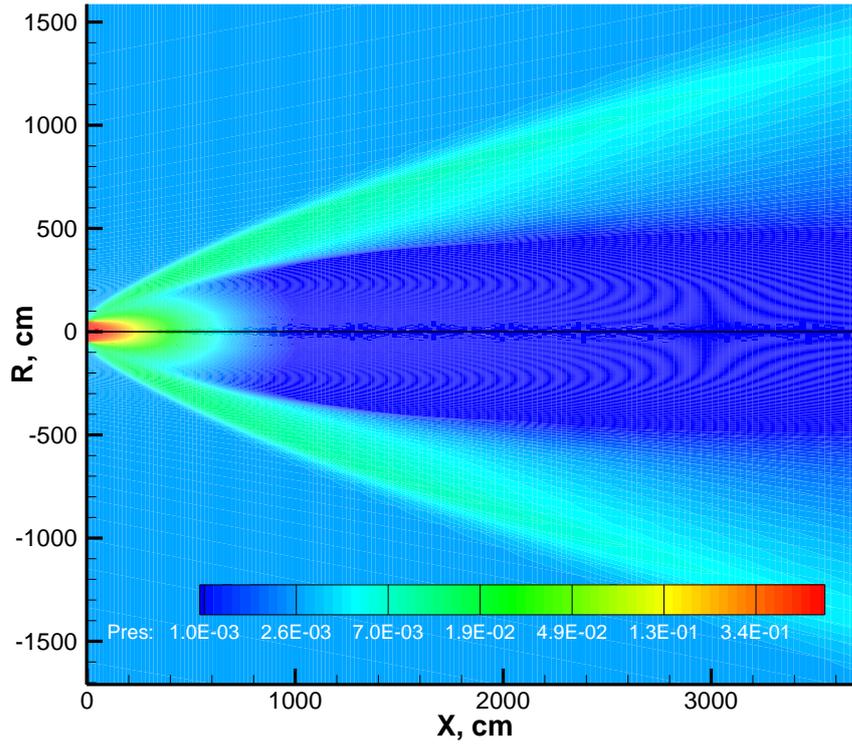


Рис. 69 Распределения давления в струе РН Atlas.

5.2. Описание пространственной (3D) модели струи продуктов сгорания

Система уравнений, выражающая законы сохранения для вязкого теплопроводного сжимаемого газа, в трехмерной ортогональной цилиндрической системе координат может быть сформулирована в следующей форме:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r}(\rho U^r) + \frac{\partial}{\partial \varphi}(\rho U^\varphi) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho U^z) &= -\frac{\rho U^r}{r} \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho U^r) + \frac{\partial}{\partial r}(\rho U^r U^r + P) + \frac{\partial}{\partial \varphi}(\rho U^r U^\varphi) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho U^r U^z) &= \\ \frac{\partial}{\partial r} \left(\underbrace{2\mu \frac{\partial U^r}{\partial r} - \frac{2}{3} \mu \operatorname{div}(\mathbf{U})}_{\tau_{rr}} \right) + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\underbrace{\frac{\mu}{r} \left(r \frac{\partial U^\varphi}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial U^r}{\partial \varphi} \right)}_{\tau_{r\varphi}} \right) + \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(\underbrace{\mu \left(\frac{\partial U^z}{\partial r} + \frac{\partial U^r}{\partial z} \right)}_{\tau_{rz}} \right) + 2\mu \left(\underbrace{\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{U^r}{r} \right) - \frac{1}{r^2} r \frac{\partial U^\varphi}{\partial \varphi}}_{\tau^{rr} \left(\frac{1}{r} \right) - r\tau^{\varphi\varphi}} \right) &= \frac{\rho (U^r)^2}{r} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t}(\rho r U^\varphi) + \frac{\partial}{\partial r}(\rho r U^\varphi U^r) + \frac{\partial}{\partial \varphi}(\rho r U^\varphi U^\varphi) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho r U^\varphi U^z) = \\
& -\frac{1}{r} \frac{\partial P}{\partial \varphi} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\underbrace{\mu \left(r \frac{\partial U^\varphi}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial U^r}{\partial \varphi} \right)}_{r\tau^{\varphi r}} \right) + \\
& \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\underbrace{\left(\frac{2\mu}{r} \left(\frac{1}{r} r \frac{\partial U^\varphi}{\partial \varphi} + \frac{U^r}{r} \right) - \frac{1}{r} \frac{2}{3} \mu \operatorname{div}(\mathbf{U}) \right)}_{r\tau^{\varphi\varphi}} \right) + \\
& \frac{\partial}{\partial z} \left(\underbrace{\mu \left(r \frac{\partial U^\varphi}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial U^z}{\partial \varphi} \right)}_{r\tau^{\varphi z}} \right) + \underbrace{\frac{2\mu}{r} \left(r \frac{\partial U^\varphi}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial U^r}{\partial \varphi} \right)}_{2\tau^{\varphi r}} \\
& \frac{\partial}{\partial t}(\rho U^z) + \frac{\partial}{\partial r}(\rho U^z U^r) + \frac{\partial}{\partial \varphi}(\rho U^z U^\varphi) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho U^z U^z) = \\
& -\frac{\partial P}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\underbrace{\mu \left(\frac{\partial U^z}{\partial r} + \frac{\partial U^r}{\partial z} \right)}_{\tau^{rz}} \right) + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\underbrace{\mu \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial U^z}{\partial \varphi} + \frac{\partial U^\varphi}{\partial z} \right)}_{\tau^{z\varphi}} \right) + \\
& \frac{\partial}{\partial z} \left(\underbrace{2\mu \left(\frac{\partial U^z}{\partial z} \right) - \frac{2}{3} \mu \operatorname{div}(\mathbf{U})}_{\tau^{zz}} \right) + \underbrace{\mu \left(\frac{\partial U^z}{\partial r} + \frac{\partial U^r}{\partial z} \right) \left(\frac{1}{r} \right)}_{\tau^{rz}/r} - \frac{\rho U^z U^r}{J}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r}(\rho h U^r) + \frac{\partial}{\partial \varphi}(\rho h U^\varphi) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho h U^z) = \\
& \frac{\partial p}{\partial t} + U^r \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{r U^\varphi}{r} \frac{\partial p}{\partial \varphi} + U^z \frac{\partial p}{\partial z} - \frac{\rho h U^r}{r} \\
& + \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\lambda}{r^2} \frac{\partial T}{\partial \varphi} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) \\
& + \Phi_\mu
\end{aligned}$$

, где

$$\Phi_\mu = \mu \left(\begin{aligned} & 2 \left(\frac{\partial U^r}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial U^r}{\partial \varphi} + r \frac{\partial U^\varphi}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial U^\varphi}{\partial \varphi} + \frac{U^r}{r} \right)^2 + \\ & \left(\frac{\partial U^z}{\partial r} + \frac{\partial U^r}{\partial z} \right)^2 + \left(r \frac{\partial U^\varphi}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial U^z}{\partial \varphi} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial U^z}{\partial z} \right)^2 \end{aligned} \right) - \frac{2}{3} \mu (\operatorname{div}(\mathbf{U}))^2$$

диссипативная функция, $h = e + \frac{p}{\rho}$ - энтальпия, t - время; x, r, φ - ортогональные

цилиндрические координаты; U^r, U^φ, U^z - проекции скорости \mathbf{U} на оси координат x, r, φ ; p, ρ - давление и плотность; T - температура поступательного движения

частиц, μ, λ динамический коэффициент вязкости и коэффициент теплопроводности.;

c_p - удельная теплоемкость смеси при постоянном давлении. $\tau^{rr}, \tau^{\varphi\varphi}, \tau^{zz}, \tau^{rz}, \tau^{\varphi z}, \tau^{r\varphi}$, -

компоненты вязкого тензора:

$$\tau^{rr} = 2\mu \frac{\partial U^r}{\partial r} - \frac{2}{3} \mu \operatorname{div}(U)$$

$$\tau^{\varphi\varphi} = \frac{2\mu}{r^2} \left(\frac{\partial U^\varphi}{\partial \varphi} + \frac{U^r}{r} \right) - \frac{2}{3} \frac{\mu}{r^2} \operatorname{div}(U)$$

$$\tau^{zz} = 2\mu \left(\frac{\partial U^z}{\partial z} \right) - \frac{2}{3} \mu \operatorname{div}(U)$$

$$\tau^{\varphi r} = \tau^{r\varphi} = \frac{\mu}{r} \left(\frac{\partial (rU^\varphi)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial U^r}{\partial \varphi} - \frac{(rU^\varphi)}{r} \right)$$

$$\tau^{zr} = \tau^{rz} = \mu \left(\frac{\partial U^z}{\partial r} + \frac{\partial U^r}{\partial z} \right)$$

$$\tau^{\varphi z} = \tau^{z\varphi} = \mu \left(\frac{\partial U^\varphi}{\partial z} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial U^z}{\partial \varphi} \right).$$

Система уравнений в векторной форме

$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r}(\mathbf{E}) + \frac{\partial}{\partial \varphi}(\mathbf{F}) + \frac{\partial}{\partial z}(\mathbf{G}) = \frac{\partial}{\partial r}(\mathbf{E}_\mu) + \frac{\partial}{\partial \varphi}(\mathbf{F}_\mu) + \frac{\partial}{\partial z}(\mathbf{G}_\mu) + \mathbf{H}$$

$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho U^r \\ \rho r U^\varphi \\ \rho U^z \\ \rho h \end{bmatrix}; \mathbf{E} = \begin{bmatrix} \rho U^r \\ \rho U^r U^r + P \\ \rho r U^\varphi U^r \\ \rho U^z U^r \\ \rho h U^r \end{bmatrix}; \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \rho U^\varphi \\ \rho U^r U^\varphi \\ \rho r U^\varphi U^\varphi + P/r \\ \rho U^z U^\varphi \\ \rho h U^\varphi \end{bmatrix}; \mathbf{G} = \begin{bmatrix} \rho U^z \\ \rho U^r U^z \\ \rho r U^\varphi U^z \\ \rho U^z U^z + P \\ \rho h U^z \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{E}_\mu = \begin{bmatrix} 0 \\ 2\mu \frac{\partial U^r}{\partial r} - \frac{2}{3} \mu \operatorname{div}(\mathbf{U}) \\ \mu \left(r \frac{\partial U^\varphi}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial U^r}{\partial \varphi} \right) \\ \mu \left(\frac{\partial U^z}{\partial r} + \frac{\partial U^r}{\partial z} \right) \\ \lambda \frac{\partial T}{\partial r} \end{bmatrix}; \mathbf{F}_\mu = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{\mu}{r} \left(r \frac{\partial U^\varphi}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial U^r}{\partial \varphi} \right) \\ \frac{2\mu}{r} \left(\frac{1}{r} r \frac{\partial U^\varphi}{\partial \varphi} + \frac{U^r}{r} \right) - \frac{1}{r} \frac{2}{3} \mu \operatorname{div}(\mathbf{U}) \\ \mu \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial U^z}{\partial \varphi} + \frac{\partial U^\varphi}{\partial z} \right) \\ \frac{\lambda}{r^2} \frac{\partial T}{\partial \varphi} \end{bmatrix};$$

$$\mathbf{G}_\mu = \begin{bmatrix} 0 \\ \mu \left(\frac{\partial U^z}{\partial r} + \frac{\partial U^r}{\partial z} \right) \\ \mu \left(r \frac{\partial U^\varphi}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial U^z}{\partial \varphi} \right) \\ 2\mu \left(\frac{\partial U^z}{\partial z} \right) - \frac{2}{3} \mu \operatorname{div}(\mathbf{U}) \\ \lambda \frac{\partial T}{\partial z} \end{bmatrix};$$

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} -\frac{\rho U^r}{r} \\ 2\mu \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{U^r}{r} \right) - \frac{1}{r} r \frac{\partial U^\varphi}{\partial \varphi} \right) - \frac{\rho (U^r)^2}{r} \\ \frac{2\mu}{r} \left(r \frac{\partial U^\varphi}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial U^r}{\partial \varphi} \right) \\ \frac{\mu}{r} \left(\frac{\partial U^z}{\partial r} + \frac{\partial U^r}{\partial z} \right) - \frac{\rho U^z U^r}{r} \\ \frac{\partial p}{\partial t} + U^r \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{r U^\varphi}{r} \frac{\partial p}{\partial \varphi} + U^z \frac{\partial p}{\partial z} - \frac{\rho h U^r}{r} + \frac{1}{r} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \Phi_\mu \end{bmatrix};$$

3D система уравнений Навье-Стокса в криволинейных координатах

Система уравнений, выражающая законы сохранения для вязкого теплопроводного сжимаемого газа[141]–[144], в трехмерной ортогональной цилиндрической системе координат может быть сформулирована в следующей форме:

$$r \rightarrow \eta(r, z)$$

$$z \rightarrow \xi(r, z)$$

$$\varphi \rightarrow \varphi$$

x, r, φ - ортогональные цилиндрические координаты, ξ, η, φ - криволинейные координаты. В криволинейной системе координат производные преобразуются следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial r} = \xi_r \frac{\partial}{\partial \xi} + \eta_r \frac{\partial}{\partial \eta}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \xi_z \frac{\partial}{\partial \xi} + \eta_z \frac{\partial}{\partial \eta}$$

$$\xi_z = \frac{\partial \xi}{\partial z}, \quad \xi_r = \frac{\partial \xi}{\partial r}, \quad \eta_z = \frac{\partial \eta}{\partial z}, \quad \eta_r = \frac{\partial \eta}{\partial r},$$

$$J = \det \begin{bmatrix} \xi_z & \xi_r \\ \eta_z & \eta_r \end{bmatrix} = \xi_z \eta_r - \xi_r \eta_z$$

где $\xi_r, \xi_z, \eta_r, \eta_z$ - производные сеточных функций по координатным направлениям, J - якобиан.

Тогда система уравнений в векторной форме в криволинейных координатах переписется в следующем виде:

$$\frac{\partial \mathbf{f}^*}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \xi}(\mathbf{E}^*) + \frac{\partial}{\partial \varphi}(\mathbf{F}^*) + \frac{\partial}{\partial \eta}(\mathbf{G}^*) = \frac{\partial}{\partial \xi}(\mathbf{E}_{\mu}^*) + \frac{\partial}{\partial \varphi}(\mathbf{F}_{\mu}^*) + \frac{\partial}{\partial \eta}(\mathbf{G}_{\mu}^*) + \mathbf{H}^*$$

$$\mathbf{f}^* = \frac{\mathbf{f}}{J};$$

$$\mathbf{E}^* = \frac{\xi_r}{J} \mathbf{E} + \frac{\xi_z}{J} \mathbf{G}$$

$$\mathbf{F}^* = \frac{\mathbf{F}}{J}$$

$$\mathbf{G}^* = \frac{\eta_r}{J} \mathbf{E} + \frac{\eta_z}{J} \mathbf{G}$$

$$\mathbf{f}^* = \frac{1}{J} \begin{bmatrix} \rho \\ \rho U^r \\ \rho r U^\varphi \\ \rho U^z \\ \rho h \end{bmatrix}; \mathbf{E}^* = \frac{1}{J} \begin{bmatrix} \rho(\xi_r U^r + \xi_z U^z) \\ \rho U^r (\xi_r U^r + \xi_z U^z) + \xi_r P \\ \rho r U^\varphi (\xi_r U^r + \xi_z U^z) \\ \rho U^z (\xi_r U^r + \xi_z U^z) \\ \rho h (\xi_r U^r + \xi_z U^z) \end{bmatrix}; \mathbf{F}^* = \frac{1}{J} \begin{bmatrix} \rho U^\varphi \\ \rho U^r U^\varphi \\ \rho r U^\varphi U^\varphi + \frac{P}{r} \\ \rho U^z U^\varphi \\ \rho h U^\varphi \end{bmatrix};$$

$$\mathbf{G}^* = \frac{1}{J} \begin{bmatrix} \rho(\eta_r U^r + \eta_z U^z) \\ \rho U^r (\eta_r U^r + \eta_z U^z) + \eta_r P \\ \rho r U^\varphi (\eta_r U^r + \eta_z U^z) \\ \rho U^z (\eta_r U^r + \eta_z U^z) + P \\ \rho h (\eta_r U^r + \eta_z U^z) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{E}_\mu^* = \frac{1}{J} \begin{bmatrix} 0 \\ (\xi_r \tau^{rr} + \xi_z \tau^{rz}) \\ (\xi_r \tau^{\varphi r} + \xi_z \tau^{\varphi z}) \\ (\xi_r \tau^{zr} + \xi_z \tau^{zz}) \\ \lambda(\xi_r^2 + \xi_z^2) \frac{\partial T}{\partial \xi} + \lambda(\xi_r \eta_r + \xi_z \eta_z) \frac{\partial T}{\partial \eta} \end{bmatrix}; \mathbf{F}_\mu^* = \frac{1}{J} \begin{bmatrix} 0 \\ \tau^{r\varphi} \\ \tau^{\varphi\varphi} \\ \tau^{z\varphi} \\ \lambda \frac{1}{r^2} \frac{\partial T}{\partial \varphi} \end{bmatrix};$$

$$\mathbf{G}_\mu^* = \frac{1}{J} \begin{bmatrix} 0 \\ (\eta_r \tau^{rr} + \eta_z \tau^{rz}) \\ (\eta_r \tau^{\varphi r} + \eta_z \tau^{\varphi z}) \\ (\eta_r \tau^{zr} + \eta_z \tau^{zz}) \\ \lambda(\eta_r^2 + \eta_z^2) \frac{\partial T}{\partial \eta} + \lambda(\xi_r \eta_r + \xi_z \eta_z) \frac{\partial T}{\partial \xi} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{H}^* = \frac{1}{J} \begin{bmatrix} -\frac{\rho U^r}{r} \\ 2\mu J \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\xi_r}{J} \frac{U^r}{r} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\eta_r}{J} \frac{U^r}{r} \right) - \frac{1}{J} \frac{1}{r} \frac{\partial (rU^\varphi)}{\partial \varphi} \right) - J \frac{1}{J} \frac{\rho (U^r)^2}{r} \\ \frac{2\mu}{r} J \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\xi_r}{J} (rU^\varphi) \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\eta_r}{J} (rU^\varphi) \right) + \frac{1}{J} \frac{1}{r} \frac{\partial U^r}{\partial \varphi} - \frac{1}{J} \frac{(rU^\varphi)}{r} \right) \\ \frac{\mu}{r} J \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\xi_r}{J} \frac{U^z}{r} + \frac{\xi_z}{J} \frac{U^r}{r} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\eta_r}{J} \frac{U^z}{r} + \frac{\eta_z}{J} \frac{U^r}{r} \right) \right) - J \frac{1}{J} \frac{\rho U^z U^r}{r} \\ H_p^* + J \frac{\lambda}{r} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\xi_r}{J} T \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\eta_r}{J} T \right) \right) + \Phi_\mu - \frac{\rho h U^r}{r} \end{bmatrix};$$

$$H_p^* = \frac{\partial p}{\partial t} + (U^r \xi_r + U^z \xi_z) \frac{\partial p}{\partial \xi} + (U^r \eta_r + U^z \eta_z) \frac{\partial p}{\partial \eta} + \frac{rU^\varphi}{r} \frac{\partial p}{\partial \varphi}$$

$$\tau^{rr} = 2\mu J \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \left(U^r \frac{\xi_r}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(U^r \frac{\eta_r}{J} \right) \right) - \frac{2}{3} \mu J \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\xi_r}{J} U^r + \frac{\xi_z}{J} U^z \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\eta_r}{J} U^r + \frac{\eta_z}{J} U^z \right) + \frac{1}{J} \frac{1}{r} \frac{\partial (rU^\varphi)}{\partial \varphi} + \frac{1}{J} \frac{U^r}{r} \right)$$

$$\begin{aligned} \tau^{\varphi\varphi} &= \frac{2\mu}{r^2} J \left(\frac{1}{J} \frac{1}{r} \frac{\partial(rU^\varphi)}{\partial\varphi} + \frac{1}{J} \frac{U^r}{r} \right) - \\ &\quad \frac{1}{r^2} \frac{2}{3} \mu J \left(\frac{\partial}{\partial\xi} \left(\frac{\xi_r}{J} U^z + \frac{\xi_z}{J} U^r \right) + \frac{\partial}{\partial\eta} \left(\frac{\eta_r}{J} U^z + \frac{\eta_z}{J} U^r \right) + \frac{1}{J} \frac{1}{r} \frac{\partial(rU^\varphi)}{\partial\varphi} + \frac{1}{J} \frac{U^r}{r} \right) \\ \tau^{zz} &= 2\mu J \left(\frac{\partial}{\partial\xi} \left(\frac{\xi_z}{J} U^z \right) + \frac{\partial}{\partial\eta} \left(\frac{\eta_z}{J} U^z \right) \right) - \\ &\quad \frac{2}{3} \mu J \left(\frac{\partial}{\partial\xi} \left(\frac{\xi_r}{J} U^z + \frac{\xi_z}{J} U^r \right) + \frac{\partial}{\partial\eta} \left(\frac{\eta_r}{J} U^z + \frac{\eta_z}{J} U^r \right) + \frac{1}{J} \frac{1}{r} \frac{\partial(rU^\varphi)}{\partial\varphi} + \frac{1}{J} \frac{U^r}{r} \right) \\ \tau^{r\varphi} = \tau^{\varphi r} &= \frac{\mu}{r} J \left(\frac{\partial}{\partial\xi} \left(\frac{\xi_r}{J} (rU^\varphi) \right) + \frac{\partial}{\partial\eta} \left(\frac{\eta_r}{J} (rU^\varphi) \right) + \frac{1}{J} \frac{1}{r} \frac{\partial U^r}{\partial\varphi} - \frac{1}{J} \frac{(rU^\varphi)}{r} \right) \\ \tau^{rz} = \tau^{rz} &= \mu J \left(\frac{\partial}{\partial\xi} \left(\frac{\xi_r}{J} U^z + \frac{\xi_z}{J} U^r \right) + \frac{\partial}{\partial\eta} \left(\frac{\eta_r}{J} U^z + \frac{\eta_z}{J} U^r \right) \right) \\ \tau^{\varphi z} = \tau^{z\varphi} &= \mu J \left(\frac{1}{J} \frac{1}{r^2} \frac{\partial U^z}{\partial\varphi} + \frac{\partial}{\partial\xi} \left(\frac{\xi_z}{J} U^\varphi \right) + \frac{\partial}{\partial\eta} \left(\frac{\eta_z}{J} U^\varphi \right) \right) \end{aligned}$$

где $h = e + \frac{p}{\rho}$ - энтальпия, t - время; x, r, φ - ортогональные цилиндрические координаты; U^r, U^φ, U^z - проекции скорости U на оси координат x, r, φ ; p, ρ - давление и плотность; T - температура поступательного движения частиц, μ, λ - динамический коэффициент вязкости и коэффициент теплопроводности.; c_p - удельная теплоемкость смеси при постоянном давлении. $\tau^{rr}, \tau^{\varphi\varphi}, \tau^{zz}, \tau^{rz}, \tau^{\varphi z}, \tau^{r\varphi}$, - компоненты вязкого тензора.

При численном решении приведенной в данной главе системы уравнений важно правильно выбрать шаг по времени [95], так как различные физические процессы в струе имеют отличающиеся на порядки временные масштабы. В Табл. 25 приведены характерные временные масштабы физических процессов протекающих в струе ракетного двигателя, истекающей в спутный сверхзвуковой поток на высоте 40 км.

Табл. 25 Характерные временные масштабы процессов, протекающих в недорасширенной струе.

Диффузия	$\tau = \frac{L^2}{2D} = 5.66 \text{ ч}$
Теплопроводность	$\tau = \frac{L^2 \rho C_v}{\lambda} = 6.51 \text{ ч}$
Кинетика	$\tau = \frac{1}{\nu} = \frac{1}{N\nu\sigma} = 4 \times 10^{-4} \text{ с}$
Конвекция	$\tau_y = \frac{T}{V_y \partial T / \partial y} = 5 \times 10^{-4} \text{ с}$
Конвекция	$\tau_x = \frac{T}{V_x \partial T / \partial x} = 10^{-3} \text{ с}$
Газодинамика	$\tau_x = \frac{L_x}{V_x} = 5 \times 10^{-2} \text{ с}$
газодинамика	$\tau_y = \frac{L_y}{V_y} = 1.1 \times 10^{-2} \text{ с}$

5.3. Способы ускорения расчетов истечения струи продуктов сгорания: квазимаршевый метод и технология распараллеливания

Решение системы уравнений движения вязкого теплопроводного химически реагирующего газа для задачи истечения струи продуктов сгорания из сопла ракетного двигателя или двигателя ГЛА является весьма трудоемкой задачей, требующей десятки и сотни часов компьютерного времени для получения сошедшегося решения. Поэтому при решении данной задачи были реализованы различные методики ускорения расчетов, основанные на применении специального («квазимаршевого») алгоритма для получения решения задачи, а также разработке параллельной версии компьютерного кода.

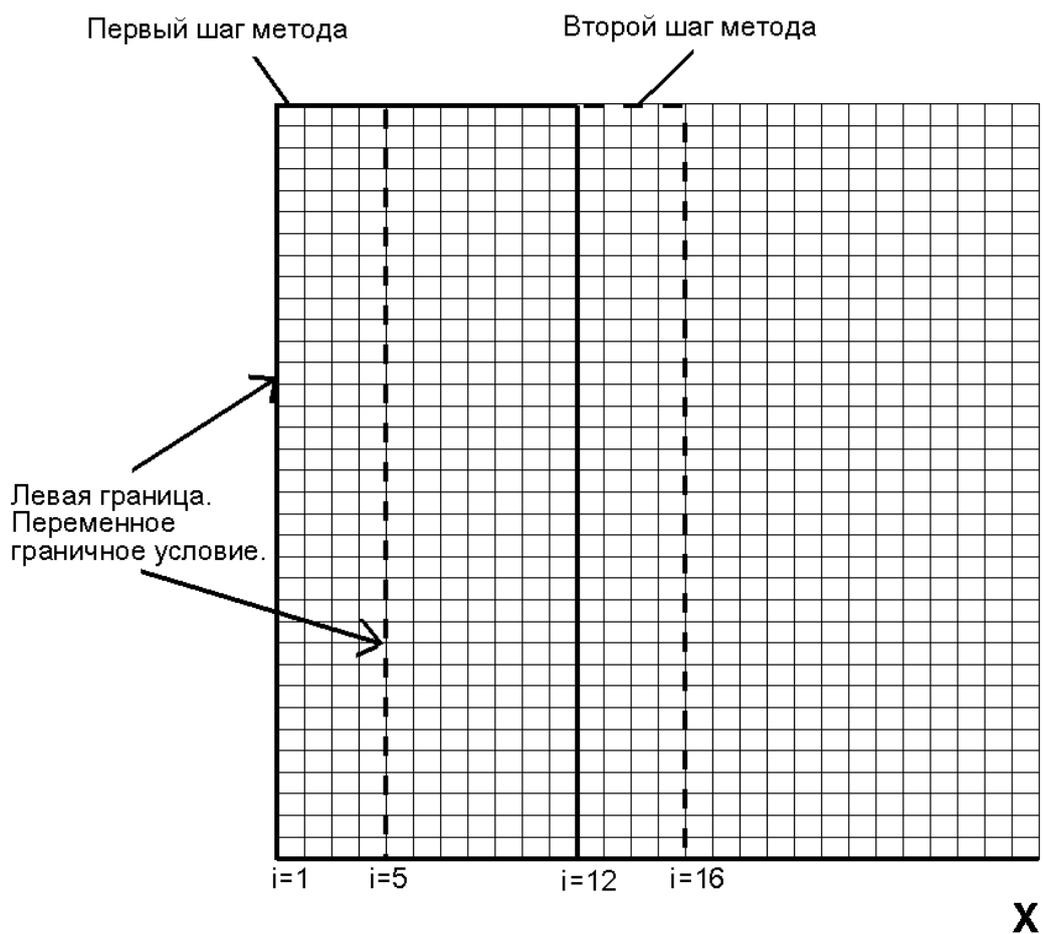


Рис. 70 Схема «квазимаршевого» метода.

Наличие выделенного направления движения газа в задачах численного моделирования течения в каналах ГПВРД [145], а также истечения струи продуктов сгорания из сопла ракетного двигателя [146] породило большое количество методов, основанных на решении упрощенной системы уравнений движения газа (параболизованная система уравнений Навье-Стокса, квазиодномерные системы уравнений движения газа в канале ГПВРД), маршевыми методами. В данной главе предлагается «квазимаршевый» подход для решения полной 2D системы уравнений движения вязкого теплопроводного химически реагирующего газа.

Пусть, требуется найти решение задачи на сетке 300×500 , где 500 – число ячеек расчетной сетки в направлении истечения струи продуктов сгорания. Вместо того, чтобы искать решение сразу во всей области 300×500 , решение полной системы уравнений (126) - (128) происходит в подобластях исходной сетки размерностью 300×12 . На первом шаге метода (Рис. 70) находится решение в области, прилегающей к соплу ракетного двигателя. Граничные условия на левой границе области задаются на основе исходных данных решаемой задачи (значения параметров на срезе сопла и в спутном потоке). После того, как в данной подобласти найдено сошедшееся решение системы уравнений, выбирается новая подобласть исходной области (300×500) такой же размерности (300×12) так, что ее левая и правая граница смещаются относительно предыдущей подобласти на 4 ячейки (Рис. 70). На левой границе новой расчетной подобласти задается новое граничное условие, соответствующее решению, полученному на предыдущем шаге ($i=4$ на Рис. 70). Таким образом на втором шаге метода ищется решение исходной системы уравнений во второй подобласти. Аналогичным образом шаги метода продолжают до тех пор, пока правая граница новой подобласти не достигнет правой границы исходной области ($i=500$). Численные эксперименты показали, что использование данного метода позволяет уменьшить время расчета в более

чем 10 раз при расчетах на одном ядре процессора, и в 4 раза для распараллеленного компьютерного кода.

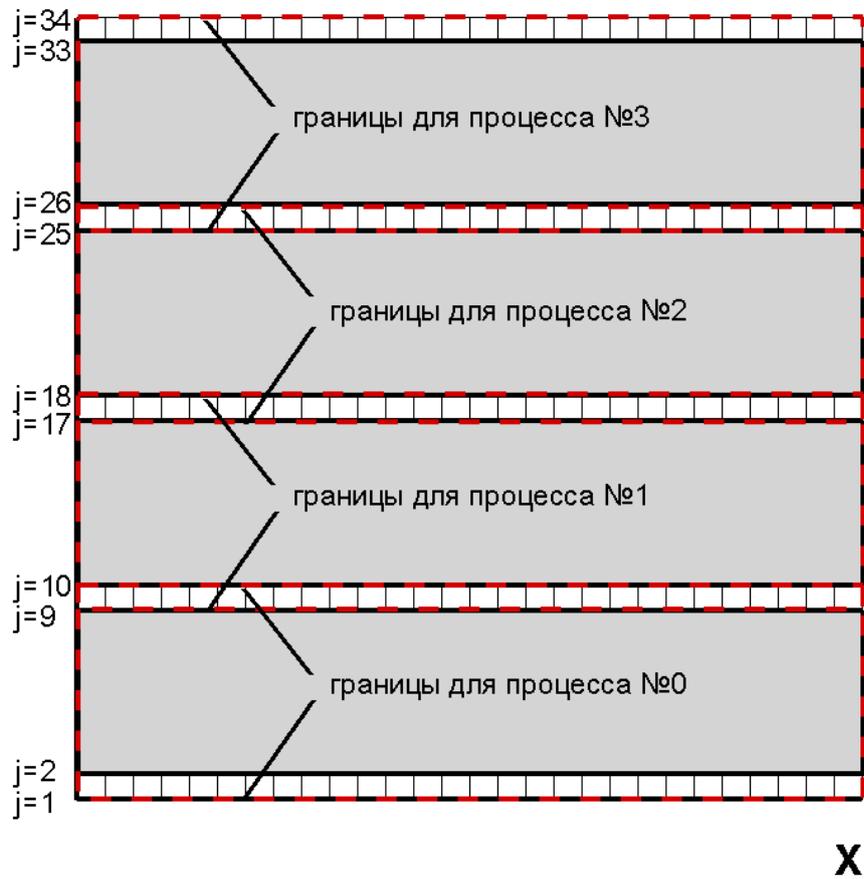


Рис. 71 Алгоритм работы параллельного компьютерного кода.

При написании распараллеленного компьютерного кода, реализующего математическую модель (126) - (128), использовались следующий алгоритм:

- 1) Расчетная область размерностью $NJ \times NI$, где NI это число точек по оси X (Рис. 71), разбивается на NB блоков размерностью $\frac{(NJ - 2)}{NB} \times NI$ каждый. Внутренние границы этих блоков пересекаются.
- 2) Решение системы уравнений (126) - (128) происходит независимо во всех внутренних точка каждого блока. Каждому процессу соответствует один блок. (Рис. 71)

3) При необходимости использования значений на границе блока (во время итерационной процедуры), вызывается подпрограмма обмена данными между блоками. Обмен происходит синхронно для всех процессов.

Эффективность работы описанного алгоритма проверялась на численных экспериментах по расчету струи продуктов сгорания РН Atlas на сетке 1000×1000 Рис. 72 (сплошная линия). На данном рисунке видно, что 128 ядрах расчет на сетке 1000×1000 ускоряется в 72 раза.

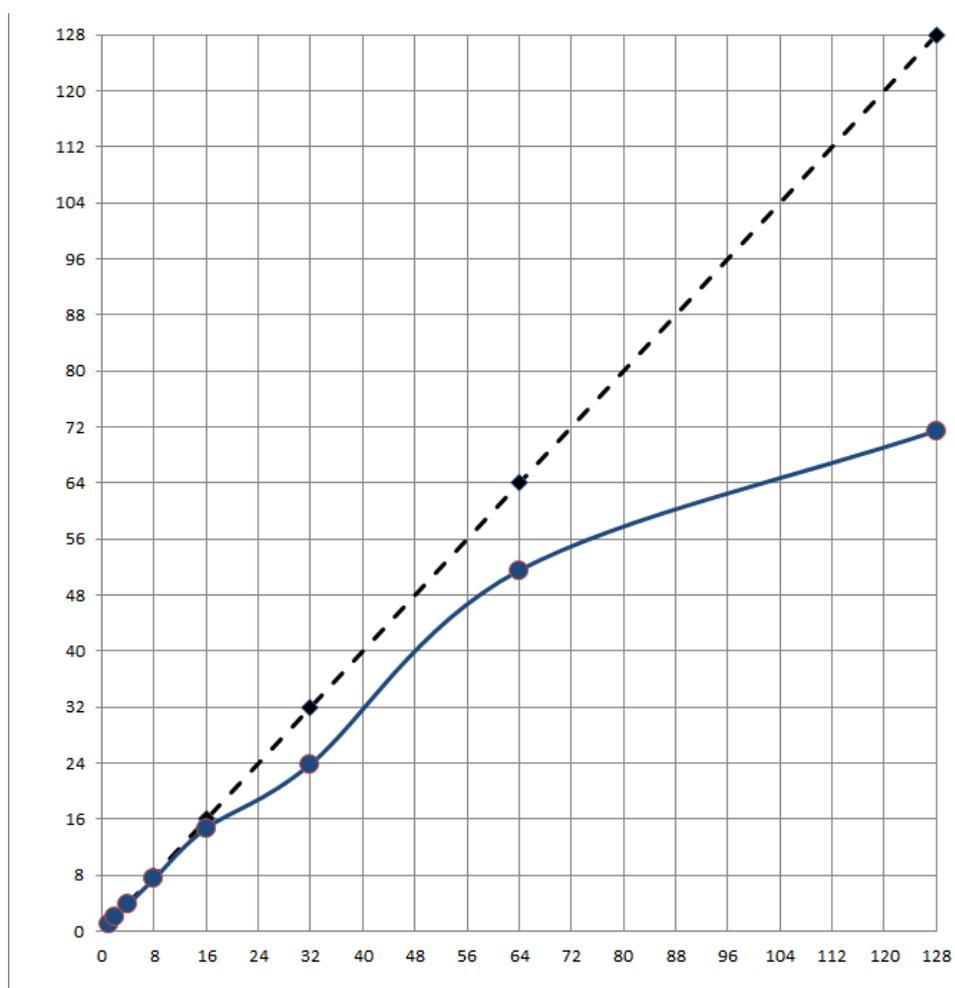


Рис. 72 Эффективность работы распараллеленного компьютерного кода на сетке 1000×1000 .

Глава 6. Спектральная излучательная способность струи продуктов сгорания

6.1. Метод прямого статистического моделирования Монте-Карло для расчета спектральной излучательной способности струи

Алгоритм численного моделирования

При относительно низкой температуре среды ($T < 2000+3000$ K), когда еще существуют твердые и жидкие частицы, процессы взаимодействия излучения с веществом являются низкоэнергетичными и не оказывают влияния на газодинамическую структуру потока. Решение задач радиационной газовой динамики при этом существенно упрощается. Сначала решается газодинамическая часть задачи. По найденным полям температуры и концентраций газа и частиц производится однократный расчет переноса излучения. Однако решение самой задачи о переносе теплоты излучением является весьма сложным из-за наличия светорассеяния.

Методы расчета переноса излучения, ориентированные на нахождение направленных излучательных характеристик, условно разделяются на три группы. К первой группе относятся такие методы расчета, которые позволяют получить точное решение уравнения переноса. Круг задач, допускающих точное решение, чрезвычайно узок. При этом накладываются сильные ограничения на геометрию исследуемой области, оптические свойства среды и граничные условия.

Ко второй группе относятся приближенные детерминированные методы решения уравнения переноса: методы сферических гармоник, дискретных ординат, характеристик.

Третью группу составляют методы статистических испытаний или методы Монте-Карло. Среди них выделим статистические методы моделирования процесса переноса излучения и статистические методы решения интегральных уравнений переноса. Остановимся на вычислительных моделях прямого статистического моделирования (имитации), нашедших широкое применение в

практике решения задач определения спектроэнергетических характеристик излучения газовых объемов.

Основу применения метода Монте-Карло составляют допущения об отсутствии взаимодействия фотонов между собой и о линейности процессов переноса излучения относительно механизмов взаимодействия квантов энергии с веществом, что позволяет моделировать реальные процессы распространения излучения поведением небольших модельных групп частиц.

Далее излагается способ применения имитационного метода Монте-Карло на примере решения задачи определения силы излучения от конечномерного объема, расположенного в пространстве произвольным образом. В такой постановке удастся решить большой круг практически важных задач, в частности о переносе излучения в светорассеивающих объемах произвольной геометрии. Для решения этой задачи необходимо задать исходную информацию, которую условно можно подразделить на четыре группы.

В 1-ю группу входят данные, задающие геометрию излучающей области. Это есть числовые массивы, содержащие координаты узлов расчетной сетки.

Во 2-ю группу исходных данных входят числовые массивы свойств среды в узлах расчетной сетки. Здесь задаются температурные поля газовой и конденсированной фазы, коэффициенты поглощения газа и полидисперсных объемов частиц, коэффициенты рассеяния полидисперсных элементарных объемов и соответствующие индикатрисы рассеяния. К этой же группе исходных данных относится шкала длин волн электромагнитного излучения, в которой требуется выполнить расчеты переноса излучения.

3-ю группу исходных данных составляют массивы угловых координат, предназначенных для дискретизации множества направлений, в которых моделируемые фотоны покидают расчетную область. Это необходимо для выполнения количественной регистрации. Таким образом, фотоны «сортируются» по дискретным направлениям, а в результате расчета получают массивы чисел фотонов, покинувших область в каждой из выделенных угловых

зон. Углы задаются в системе координат, связанной с местной нормалью к элементарной площадке, принадлежащей поверхности, охватывающей исследуемый объем.

В 4-ю группу исходных данных входят характеристики численного моделирования: число серий фотонов и число фотонов в каждой серии. Произведение числа серий и числа фотонов в серии дает полное количество разыгрываемых историй. Введение серий фотонов объясняется желанием снизить корреляцию данных, обусловленную квазислучайным характером чисел, выдаваемых программным генератором случайных чисел. Кроме этого, анализ результатов расчетов после розыгрыша каждой серии фотонов позволяет экспериментально установить степень сходимости результатов моделирования.

Метод максимального сечения

Заданием узлов расчетной сетки фактически производится дискретизация исследуемого объема на N зон. В качестве примера рассмотрим элементарный объем $h_x = x_{i+1} - x_i, i=1, 2, \dots, NI-1$, $h_y = y_{j+1} - y_j, j=1, 2, \dots, NJ-1$, $h_z = z_{k+1} - z_k, k=1, 2, \dots, NK-1$. NI, NJ, NK - число узлов сетки вдоль осей x, y, z . Осредненные свойства в элементарном объеме определяются по формуле:

$$\langle f \rangle = 0.125 \left(f(x_i, y_j, z_k) + f(x_{i+1}, y_j, z_k) + f(x_i, y_{j+1}, z_k) + f(x_{i+1}, y_{j+1}, z_k) + f(x_i, y_j, z_{k+1}) + f(x_{i+1}, y_j, z_{k+1}) + f(x_i, y_{j+1}, z_{k+1}) + f(x_{i+1}, y_{j+1}, z_{k+1}) \right)$$

Степень приближенности такого задания свойств элементарных объемов существенно зависит от качества задания расчетной сетки.

Важным моментом процедуры моделирования распространения фотонов в среде является способ расчета длины пробега фотона. Как отмечается в работе [147], на вычисление этой величины при решении реакторных задач тратится около половины всего расчетного времени. Трудоемкость решения этой задачи

обусловлена тем, что траектория частицы прослеживается отдельно в каждом элементарном объеме.

Существуют более экономичные приемы моделирования траектории в неоднородной среде, например, метод максимального сечения.

Метод максимального сечения основан на том очевидном положении, что добавление любого количества δ -рассеивателя в исследуемый объем не изменит процесса распространения фотонов (δ -рассеяние - это рассеяние без изменения направления).

Введем максимальный полный коэффициент ослабления среды:

$$\beta_{t,max} = \max_l \{ \beta_{t,l} \}, \beta_{t,l} = \kappa_{g,l} + \kappa_{p,l} + \sigma_l$$

где l - номер элементарного объема, определяемый четырьмя индексами узлов расчетной сетки; $\kappa_{g,l}$, $\kappa_{p,l}$ - коэффициенты объемного поглощения газа и частиц; σ_l - коэффициент объемного рассеяния.

Для каждого l -го элементарного объема помимо истинного коэффициента ослабления $\beta_{t,l}$ можно ввести коэффициент δ -рассеяние:

$$\beta_{\delta,l} = \beta_{t,max} - \beta_{t,l}$$

Использование характеристик $\beta_{\delta,l}$, $\beta_{t,max}$, $\beta_{t,l}$ позволяет выполнять моделирование распространения фотонов в среде с переменными свойствами так же, как и в однородной среде. При этом считается, что при столкновении с вероятностью $\beta_{\delta,l}/\beta_{t,max}$ происходит δ -рассеяние, а с вероятностью $(1 - \beta_{\delta,l}/\beta_{t,max})$ - реальное взаимодействие.

Определение начальных координат траекторий

Если на исследуемый объем падает излучение от внешних источников, то начальные координаты траекторий всех фотонов принадлежат поверхности, ограничивающей объем. При рассмотрении актов испускания фотонов элементами самого объема, координаты соответствующих точек заранее неизвестны. Изложим один из возможных алгоритмов их нахождения.

Для решения этой задачи требуется назначить число моделируемых фотонов N_f , испускаемых во всем объеме, а затем распределить эти фотоны по всем излучающим элементарным объемам (параллелепипедам). Число фотонов, излучаемых в каждом таком объеме, пропорционально отношению энергии, излучаемой этим объемом, к энергии, теряемой всей областью. Количество лучистой энергии, теряемой элементарным цилиндрическим объемом в приближении объемного высвечивания, вычисляется следующим образом:

$$H_l = 4\pi V_l (J_{b,l}^p \kappa_{p,l} + J_{b,l}^g \kappa_{g,l}), \quad V_l = (z_{k+1} - z_k)(y_{j+1} - y_k)(x_{i+1} - x_i)$$

где $J_{b,l}^p$ и $J_{b,l}^g$ - спектральные интенсивности излучения абсолютно черного тела при температурах частиц и газа.

Суммированием H_l по всем l определяется общая энергия H_V , теряемая областью. Тогда вероятность испускания квантов энергии в объеме с номером l можно представить в виде $P_l = H_l / H_V$.

Распределение фотонов по излучающим зонам следует производить с учетом величин P_l , т.е. число фотонов, испускаемых в l -й зоне $N_{f,l}$, равно целой части произведения $[N_f, P_l]$. Если просуммировать числа $N_{f,l}$ по всем l , то как правило, не получится суммарное число фотонов N_f . Оставшееся число фотонов N_f^* следует распределить по всем зонам опять с учетом величин P_l .

В работе [147] приводятся несколько способов такого распределения. Например, используется алгоритм случайной выборки номера зоны: проводится N_f^* независимых испытаний, в каждом из которых номер зоны разыгрывается из условия

$$\sum_{j=1}^{l-1} W_j \leq N_f^* \gamma < \sum_{j=1}^l W_j, \quad W_j = N_f P_j - [N_f, P_j] \quad .$$

После того, как выполнено распределение общего числа фотонов по всем излучающим зонам, следует разыграть точные координаты рождения каждой

частицы в пределах l -го объема. Причем, если распределение числа фотонов по излучающим элементарным объемам производится до начала моделирования траекторий, то определение координат рождения частиц целесообразно делать последовательно при моделировании движения каждой отдельной частицы. В этом случае в памяти ЭВМ необходимо хранить лишь N_f чисел массива $N_{f,l}$.

Для вычисления координат рождения фотонов, как и при распределении их по зонам, можно использовать как систематическую, так и случайную выборки [147]. При случайной выборке можно использовать следующие формулы для координат рождения частиц:

$$x_{em} = x_i + (x_{i+1} - x_i)\gamma$$

$$y_{em} = y_j + (y_{j+1} - y_j)\gamma$$

$$z_{em} = z_k + (z_{k+1} - z_k)\gamma$$

Определив начальные координаты траектории фотона, остается задать направляющие косинусы вектора скорости. Предполагая, что в актах испускания нет какого-либо выделенного направления, для определения направляющих косинусов вектора направления траектории испущенного фотона можно использовать способ моделирования изотропного случайного вектора.

Построение прямолинейного участка траектории в замкнутой области

Как уже отмечалось, предполагается, что от места своего рождения фотон движется прямолинейно в заданном направлении до тех пор, пока не произойдет его столкновение с частицей вещества, или же он не пересечет границу рассматриваемой области. Рассмотрим способ нахождения величины пробега фотона до его пересечения с поверхностью ограничивающей области.

В силу специального задания расчетной сетки (в рассматриваемом случае – прямоугольная декартова система координат) можно считать, что фотон движется внутри прямоугольного параллелепипеда. Фотон может столкнуться с любой из плоскостей. Координаты столкновения определяются с

использованием аппарата аналитической геометрии. Уравнения траектории фотона и плоскостей записываются в виде:

$$\frac{x - x_c}{\omega_x} = \frac{y - y_c}{\omega_y} = \frac{z - z_c}{\omega_z} = t$$

$$x = -H_x, \quad x = H_x,$$

$$y = -H_y, \quad y = H_y,$$

$$z = 0, \quad z = H_z,$$

где x_c, y_c, z_c - координаты, $\omega_x, \omega_y, \omega_z$ - направляющие косинусы вектора направления траектории.

Длина пути фотона до пересечения с одной из границ расчетной области найдется с использованием следующего алгоритма (в случае

$$\omega_x > 0, \omega_y > 0, \omega_z > 0):$$

$$x_{c1} = x_c + \omega_x t_{pl}$$

$$y_{c1} = y_c + \omega_y t_{pl}$$

$$z_{c1} = z_c + \omega_z t_{pl}$$

$$t_{pl} = \min(t_{xp}, t_{yp}, t_{zp}), \quad t_{xp} = \frac{H_x - x_c}{\omega_x}, \quad t_{yp} = \frac{H_y - y_c}{\omega_y}, \quad t_{zp} = \frac{H_z - z_c}{\omega_z}$$

Моделирование длины свободного пробега

Вероятность испытать столкновение в точке l для частицы, летящей вдоль вектора направления Ω от точки $l=0$, равна $1 - F(l)$, где $F(l)$ - функция распределения случайной величины l . Поэтому вероятность столкновения в интервале $(l \div l + dl)$ равна:

$$F(l + \Delta l) - F(l) \cong [1 - F(l)][\beta_l \Delta l + O(\Delta l)]$$

где $\beta_l \Delta l$ характеризует вероятность столкновения на элементарном отрезке луча Δl (по определению коэффициента ослабления). Разделив на Δl и перейдя к пределу при $\Delta l \rightarrow 0$, получим:

$$\frac{dF(l)}{dl} \cong [1 - F(l)] \beta_t$$

но $F(l=0) = 0$, откуда

$$F(l) = 1 - \exp\left(-\int_0^l \beta_t dl\right)$$

Учитывая, что $\beta_t = const$ (вследствие использования метода максимального сечения), получаем окончательно

$$F(l) = 1 - \exp(-\beta_t l)$$

Процедура моделирования длины свободного пробега основывается на том, что величина $F(l)$ является случайной и равномерно распределенной на $[0,1]$, т.е.

$$F(l) = \gamma. \text{ С учетом одинакового распределения } \gamma \text{ и } 1 - \gamma:$$

$$l = -\beta_t^{-1} \ln \gamma$$

Розыгрыш столкновений

Если установлено, что фотон испытывает столкновение внутри среды, т.е. $l < (l_c, l_p)$, то необходимо выяснить: произошло ложное или истинное столкновение. В первом случае в вычислительной программе следует продолжить моделирование траектории без какого-либо изменения. При этом к счетчику ложных столкновений следует добавить единицу.

Во втором случае следует разыграть тип этого столкновения:

- если это поглощение, то увеличить счетчик поглощений на единицу и приступить к моделированию новой траектории фотона;
- если моделируется неравновесное излучение, то имеется вероятность переизлучения поглощенного фотона;
- если это рассеяние, то необходимо определить новое направление движения и прибавить единицу к счетчику числа рассеяний.

Вопрос о выборе типа столкновения решается следующим образом. Выше указывалось, что при использовании метода максимального сечения вероятность δ -рассеяния есть $p_\delta = \beta_\delta / \beta_{t,max}$, а вероятность реального взаимодействия $p_{s,k} = 1 - p_\delta$. Поэтому для моделирования типа столкновения следует проверить выполнение условия $p_\delta > \gamma$, означающего, что произошло δ -рассеяние. Иначе считается, что произошло истинное столкновение.

Истинное столкновение может быть как поглощением, так и рассеянием. Генерируя новое случайное число и сравнивая его с вероятностью рассеяния $p_s = \sigma / \beta_t$, делаем вывод относительно типа столкновения. Если $\gamma < p_s$, то произошло рассеяние, а при $\gamma > p_s$, считается, что произошло поглощение.

Регистрация конца историй фотонов

В процессе моделирования траекторий фотонов в излучающей и рассеивающей средах накапливается большое количество информации, которая может быть использована для различных целей. Рассмотрим, какая информация требуется для вычисления направленной силы излучения и плотностей радиационных потоков. Для этого необходимо знать количество фотонов, покидающих поверхность, которая ограничивает объем, а также их угловое распределение на произвольно выбранной элементарной площадке. Для определения условного количества энергии, переносимого одной частицей, необходимо знание общего числа частиц, испускаемых объемом (напомним, что речь идет о моделируемых квазичастицах), количество актов поглощения и рассеяния, имевших место при имитации движения всех частиц вместе взятых.

Чтобы избежать в дальнейшем неясности в вопросе нахождения энергии частиц, определим это понятие подробнее. Исходя из физического смысла, энергия излучения определяется температурой среды (находящейся в локальном термодинамическом равновесии с излучением) и длиной волны излучения. Несмотря на то, что при моделировании распространения излучения мы

используем термин частица или фотон, физически более обосновано подразумевать под этим ансамбль невзаимодействующих частиц, энергия которого определяется не только энергией, переносимой одной частицей, но и числом этих частиц в ансамбле.

Регистрация актов поглощения

Эта регистрация состоит в подсчете общего числа поглощений. Для этого в программу вводится специальный счетчик, который регистрирует каждое поглощение частицы. Существенным моментом здесь является то, что неважно, в какой зоне излучающего объема произошло поглощение.

Число поглощений, которое, если это диктуется физикой процесса, определяет и число испусканий фотонов в актах взаимодействия с веществом, вместе с числом исходных частиц и составляет общее число фотонов, испущенных объемом.

Определение спектральной силы излучения по результатам моделирования

Каждая частица, достигающая поверхности, является носителем информации, необходимой для расчета направленной излучательной способности цилиндрической поверхности или плотности радиационного потока к ней. Регистрируются следующие данные:

- номер зоны элементарного объема;
- направление полета частицы;

Под силой излучения понимают интеграл от направленной излучательной способности поверхности, испускающей излучение, по площади этой поверхности, видимой с большого расстояния под заданным углом.

Предположим, что термодинамическое состояние среды определяется условием локального термодинамического равновесия. Тогда энергия одного фотона (ансамбля частиц) определяется из условия;

$$e_f = \frac{4\pi}{N_f} \sum_{l=1}^{N_l} (J_{b,l}^p \kappa_{p,l} + J_{b,l}^g \kappa_{g,l}) V_l$$

Зная общее число фотонов, двигающихся в заданном направлении, можно вычислить спектральную силу излучения. Сила излучения единичной площадки вычисляется с использованием теоремы о среднем

$$S(\chi^*, \theta^*) = \frac{N_f(\Delta\Omega)e_f}{A(\chi_{n+1} - \chi_n)(\cos\theta_m - \cos\theta_{m+1})}$$

где $\chi_n, \chi_{n+1}, \theta_m, \theta_{m+1}$ - угловые координаты, определяющие телесный угол $\Delta\Omega$, $\chi^* = [\chi_n, \chi_{n+1}]$, $\theta^* \subset [\theta_m, \theta_{m+1}]$, $N_f(\Delta\Omega)$ - число фотонов, покидающих элемент поверхности площадью A в пределах телесного угла $\Delta\Omega$.

Спектральная интенсивность излучения определяется как

$$J(\chi^*, \theta^*) = \frac{2N_f(\Delta\Omega)e_f}{A(\chi_{n+1} - \chi_n)(\cos^2\theta_m - \cos^2\theta_{m+1})}.$$

Расчет плотностей спектральных потоков излучения к поверхности, ограничивающей исследуемую область, производится также с использованием величины энергии одной частицы. Достаточно подсчитать общее количество фотонов N_A , достигающих выделенную площадку на поверхности под любыми углами.

Плотность одностороннего потока излучения найдется из формулы

$$W_A = \frac{N_A e_f}{A}.$$

6.2. Тестирование разработанного компьютерного кода на примере расчета сигнатуры струй продуктов сгорания твердотопливных ракетных двигателей

Сигнатура модельной струи твердотопливной ракеты с частицами Al_2O_3

В данной части работы считалось, что струя продуктов сгорания имеет цилиндрическую форму, а распределение параметров в струе является однородным. Размер цилиндра, его температура и давление, а также мольные доли химических компонент брались из работы [148]. Его длина $L = 600$ см, радиус $r = 10$ см. Цилиндр считался изотермическим с $T = 1000$ К и давлением $p = 1$ атм. Считалось, что распределения газа и твердых частиц однородное. Все твердые частицы имеют сферическую форму и одинаковый радиус. Химический состав, а также параметры твердых частиц представлены в Табл. 26. Угол обзора в расчетах полагался равным 90° .

Табл. 26 Химический состав и параметры твердых частиц в струе.

компонента	Мольная доля	Мольная доля	плотность, $г * см^{-3}$	Концентрация, $см^{-3}$		
				R = 0.1 мкм	R	R = 5 мкм
HCL	0.13					
HF	—	0.001	1.25E-06	8.08E+07	8.08E+04	6.46E+02
H ₂	(0.40)	0.01	1.26E-05	8.15E+08	8.15E+05	6.52E+03
H ₂ O	0.30	0.1	1.39E-04	96E+09	96E+06	17E+04
CO	0.02	0.5	1.25E-03	07E+10	07E+07	45E+05
CO ₂	—					
Al ₂ O ₃	(0.5)					

Коэффициенты поглощения и преломления для твердых частиц были рассчитаны с использованием теории Ми. Результаты численного моделирования спектральной излучательной способности показывают, что спектральная излучательная способность струи продуктов сгорания зависит от мнимой части коэффициента преломления частиц Al_2O_3 (см). Сравнение данных по мнимой части коэффициента преломления Al_2O_3 , имеющихся в литературе, приведено на Рис. 73. На данном графике показано, что значения мнимой части

коэффициента преломления зависят от температуры и фазового состояния вещества, и отличаются на несколько порядков.

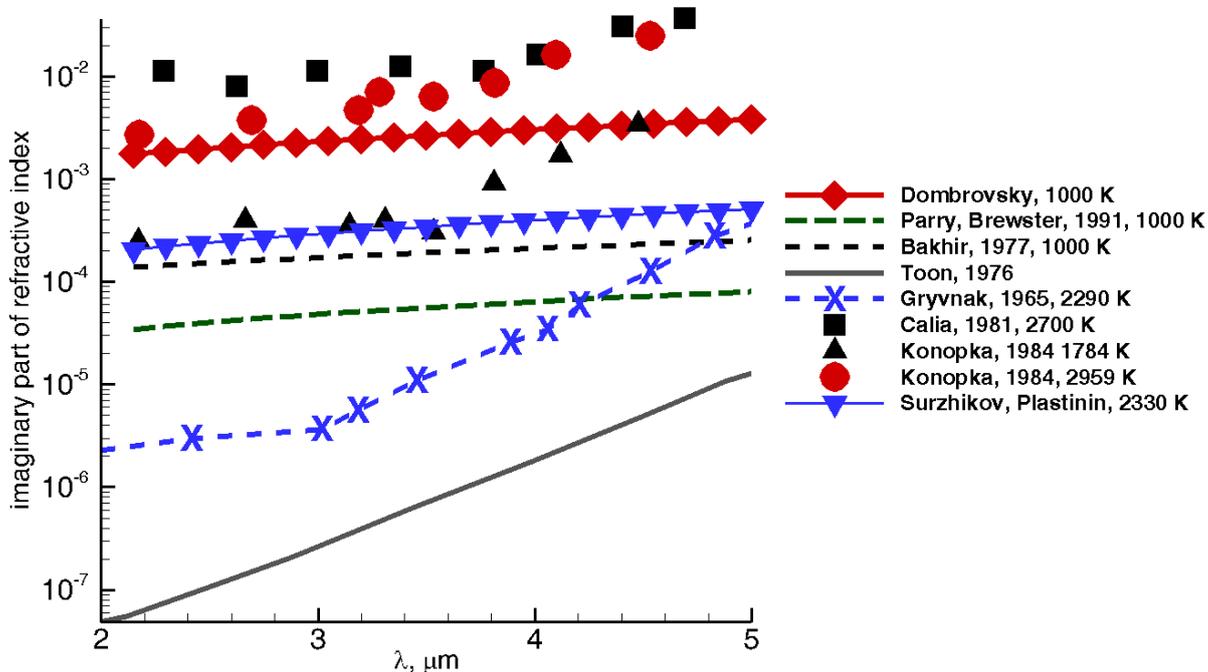


Рис. 73 Сравнение мнимой части коэффициента преломления.

Влияние мнимой части коэффициента преломления двух различных авторов показано на Рис. 75. Результаты численного моделирования представлены для радиуса твердых частиц $r=1\text{ мкм}$ и различных концентраций. Для анализа влияния мнимой части коэффициента преломления использовались данные [149] и [150]. На Рис. 75 видно, что с увеличением концентрации твердых частиц различие спектральной сигнатуры, рассчитанной с использованием данных [149] и данных [150] растет в диапазонах $\omega = 2400 \div 3000\text{ см}^{-1}$ и $\omega = 4100 \div 5000\text{ см}^{-1}$. В то же время в диапазонах волнового числа $\omega = 2000 \div 2400\text{ см}^{-1}$ и $\omega = 3000 \div 4100\text{ см}^{-1}$, где спектральная излучательная способность имеет максимумы (излучение CO_2 и H_2O), результаты расчета отличаются незначительно.

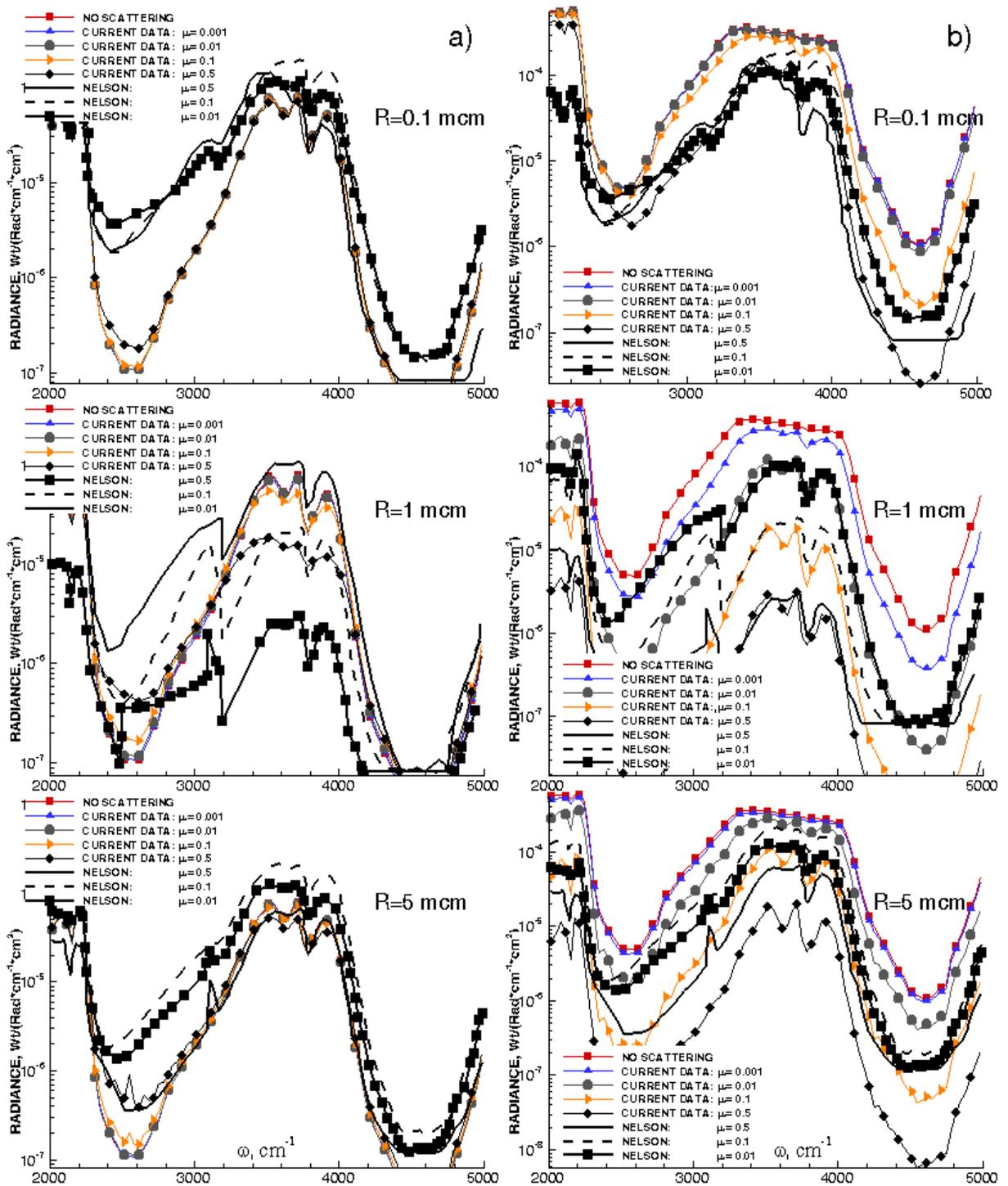


Рис. 74 Спектральная излучательная способность струи продуктов сгорания, рассчитанная для всего излучающего объема (а) и вдоль луча (б), проходящего через диаметр и сравнение с данными [148].

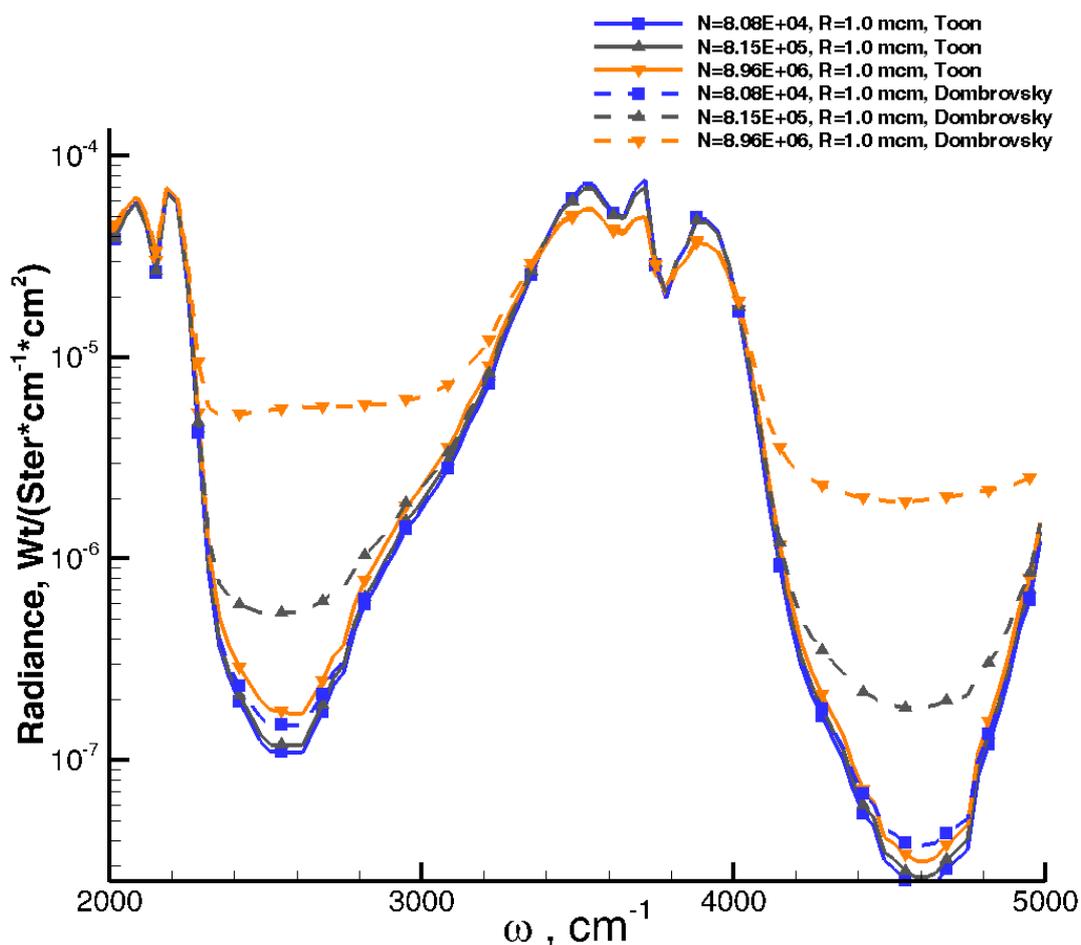


Рис. 75 Спектральная сигнатура, рассчитанная с использованием различных значений мнимой части коэффициента преломления.

Результаты численного моделирования [151], [152] для различного числа и радиуса твердых частиц, а также сравнение с результатами численного моделирования из работы [148] представлены на Рис. 74. На данном рисунке представлены результаты численного моделирования сигнатуры в 2х постановках: первая серия расчетов (левая колонка) проводилась для всего излучающего объема, вторая серия расчетов (правая колонка) показывает спектральное излучения вдоль луча проходящего через диаметр струи. Результаты численного моделирования, полученные с использованием данных [150] демонстрируют удовлетворительное согласие с данными [148].

Сигнатура модельной струи твердоотопливной ракеты с частицами B_2O_3

В данной части работы считалось, что струя продуктов сгорания имеет цилиндрическую форму, а распределение параметров в струе является однородным. Размер цилиндра, его температура и давление, а также мольные доли химических компонент брались из работы [153]. Его длина $L=1500$ см, радиус $r=75$ см. Считалось, что распределения газа и твердых частиц однородное. Все твердые частицы имеют сферическую форму и одинаковый радиус. Химический состав, давление и температура в струе, а также параметры твердых частиц представлены в Табл. 27.

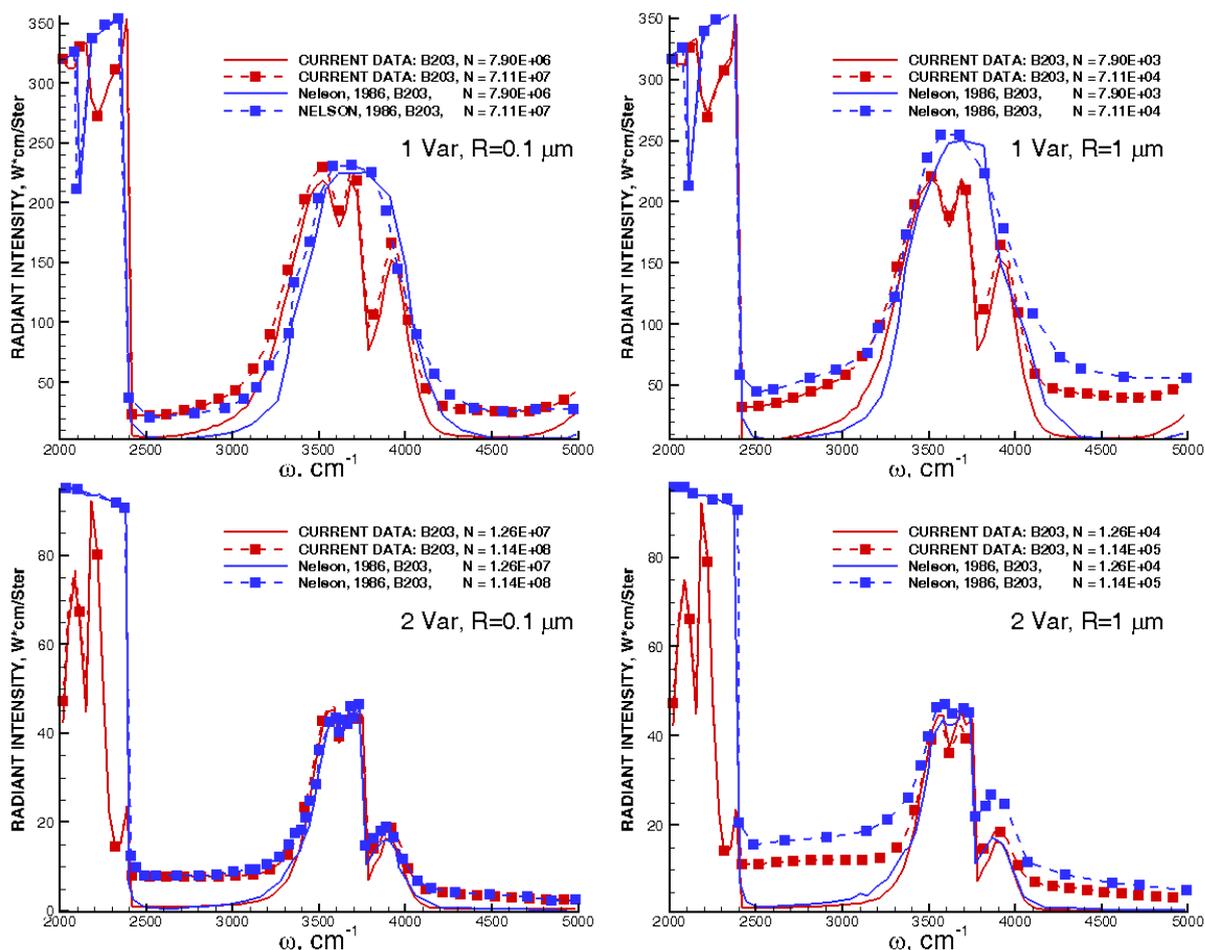


Рис. 76 Сравнение спектральной сигнатуры струи продуктов сгорания с частицами B_2O_3 с данными [153].

Табл. 27 Химический состав и параметры твердых частиц в струе с частицами B_2O_3 .

Мольная доля	Плотность ρ , $г * см^{-3}$	Концентрация $см^{-3}$		CO_2	H_2O	CO	HBO_2	N_2
		$R = 0.1$ мкм	$R = 1$ мкм					
Вариант 1								
0.00011	9.53E-08	1.26E+07	1.26E+04	0.14	0.06	0.03	0.00	0.57
0.00025	2.14E-07	2.84E+07	2.84E+04	0	0	0	1	9
0.00100	8.58E-07	1.14E+08	1.14E+05					
Вариант 2								
0.00011	5.95E-08	7.90E+06	7.90E+03	0.30	0.02	0.02	0.02	0.79
0.00025	1.34E-07	1.78E+07	1.78E+04	0	0	0	0	0
0.00100	5.36E-07	7.11E+07	7.11E+04					

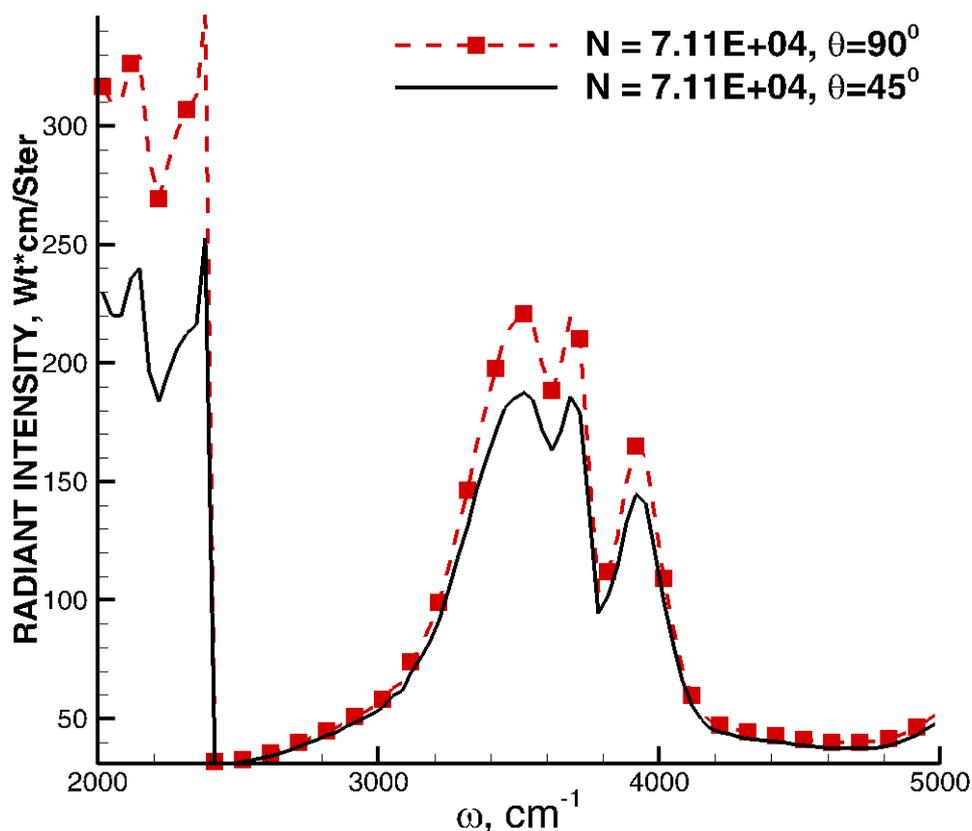


Рис. 77 Сигнатура струи продуктов сгорания при разных углах обзора.

Результаты численного моделирования для различного числа и радиуса твердых частиц, а также сравнение с результатами численного моделирования из работы [153] представлены на Рис. 76. Две серии результатов численного моделирования представлены для различных значений температуры и мольных долей

химических компонент в струе. (см Табл. 27). Результаты численного моделирования спектральной излучательной способности струи продуктов сгорания для разных углов обзора ($\theta = 90^0$ и $\theta = 45^0$) дано на Рис. 77. Результаты численного моделирования соответствуют варианту 2 в Табл. 27, концентрация твердых частиц полагалась равной $N = 7.11E + 04$, а их радиус $r = 1 \text{ мкм}$. На графике видно, что с уменьшением угла обзора с $\theta = 90^0$ до $\theta = 45^0$ локальный максимум спектральной излучательной способности в диапазоне $\omega = 3300 - 4000 \text{ см}^{-1}$ (соответствует эмиссии H_2O) уменьшается.

Спектральная излучательная способность струи тактической ракеты

Начальные данные для численного моделирования были взяты из работы [154]. Температура продуктов сгорания на выходе сопла полагалась равной $T = 2070 \text{ К}$ а давление $p = 1.069 \text{ атм}$. Химический состав продуктов сгорания на выходе сопла представлен в Табл. 28.

Табл. 28 химический состав продуктов сгорания.

компонент	Массовая доля
CO_2	0.103
H_2O	0.0124
CO	0.169

Радиус ракеты полагался равным $r = 8 \text{ см}$, а радиус сопла $r = 3.61 \text{ см}$. Скорость истечения продуктов сгорания из сопла в работе [154] не представлена, поэтому в расчетах она варьировалась. Результаты численного моделирования истечения струи продуктов сгорания из сопла ракетного двигателя тактической ракеты представлены на Рис. 78. На данном рисунке даны двумерные распределения плотности, температуры и массовых долей химических компонент в плоскости симметрии струи. Данные результаты были получены для скорости истекающих из сопла продуктов сгорания $V = 1476 \text{ м/с}$. Сравнение осевых распределений температуры и мольных долей химических компонент в

струе для двух различных скоростей ($V = 1476 \text{ m/s}$ и $V = 3000 \text{ m/s}$) даны на Рис. 80.

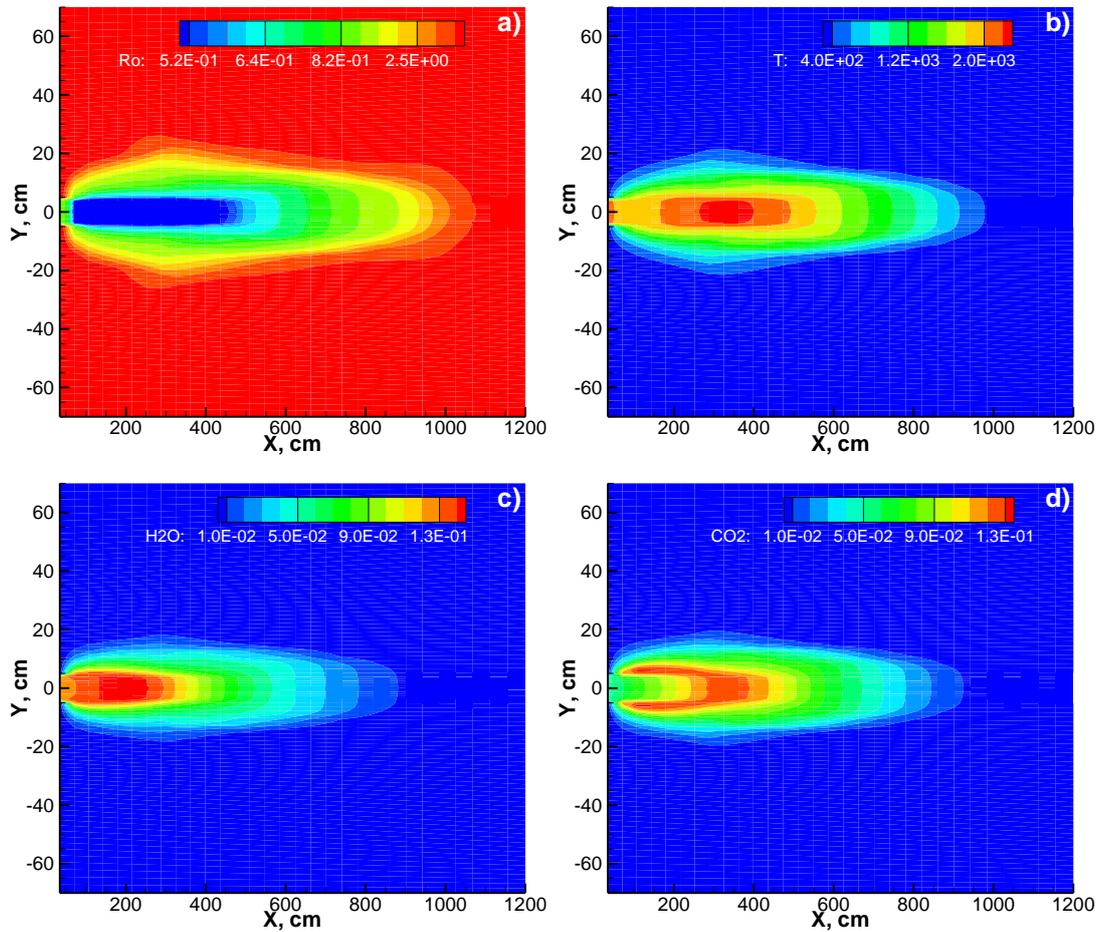


Рис. 78 Пространственное распределение плотности (а), температуры (б), массовых долей H_2O (в) и CO_2 (д).

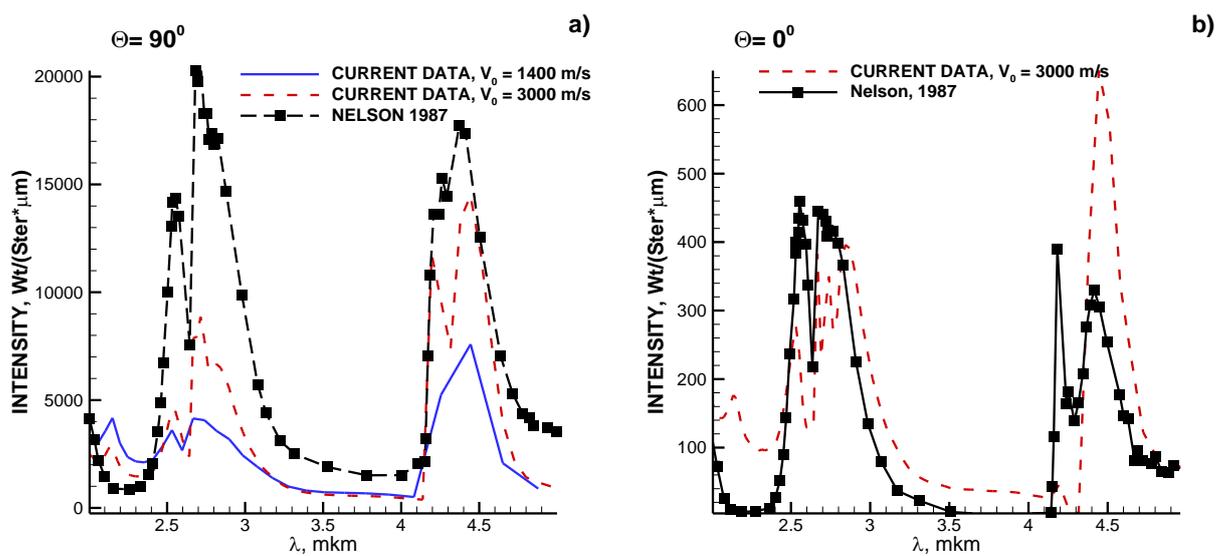


Рис. 79 Спектральная сигнатура струи продуктов сгорания для $\Theta = 90^\circ$ (а) и $\Theta = 0^\circ$ (б).

Спектральная сигнатура струи продуктов сгорания для разных углов обзора ($\Theta = 0^\circ$ и $\Theta = 90^\circ$) показана на Рис. 79. В случае $\Theta = 0^\circ$ считалось, что ракета частично закрывает излучающую струю днищем.

Пространственное распределение параметров в струе (температура и массовая доля H_2O) на разных высотах дано на Рис. 81. С увеличением высоты радиальные размеры струи значительно увеличиваются, а локальный максимум температуры на оси симметрии уменьшается, что отражается на спектральной излучательной способности струи (см Рис. 82).

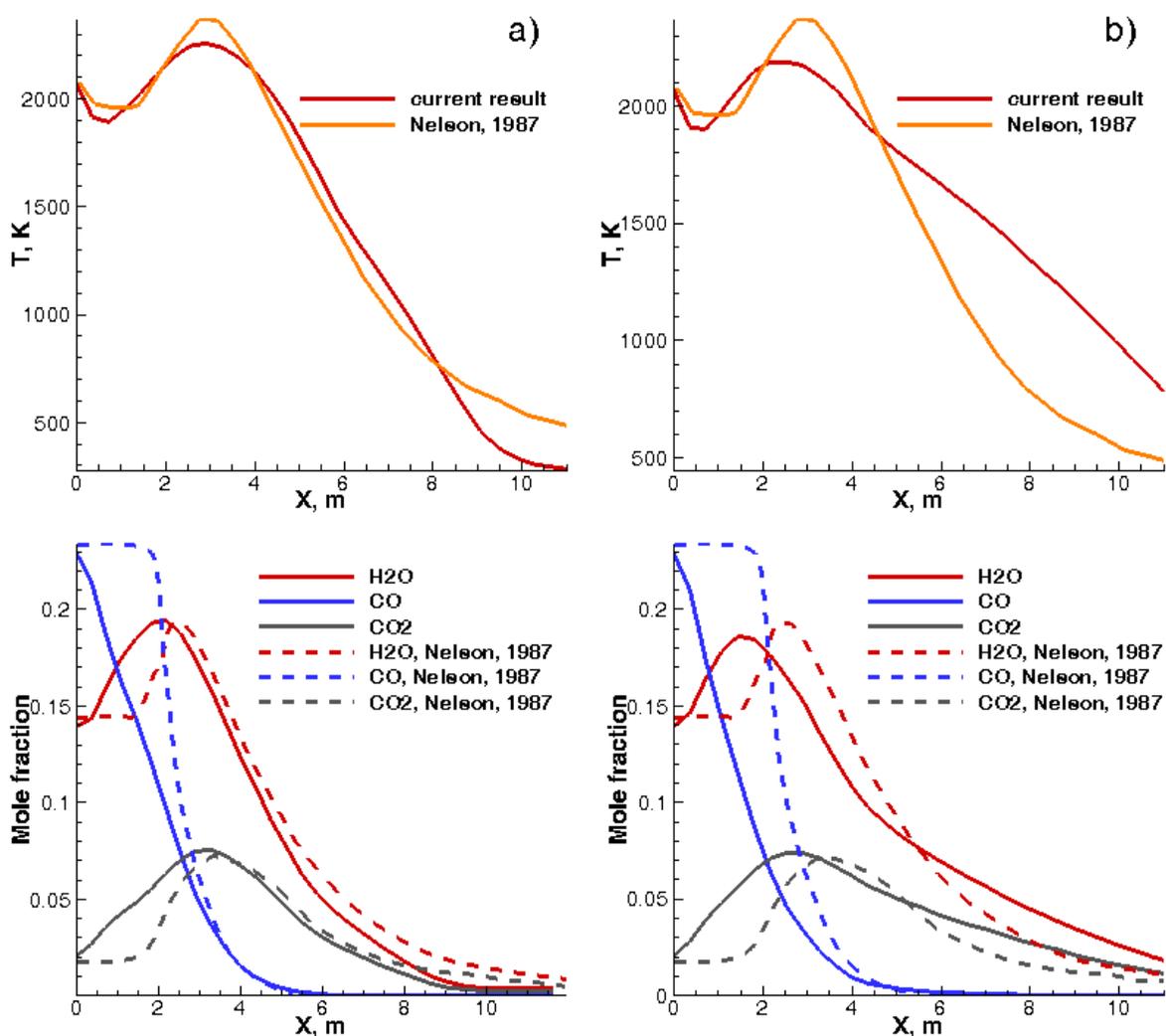


Рис. 80 Осевое распределение температуры (вверху), и массовых долей (внизу) для различных значений скорости истечения продуктов сгорания: $V = 1476$ m/s (a) и $V = 3000$ m/s (b).

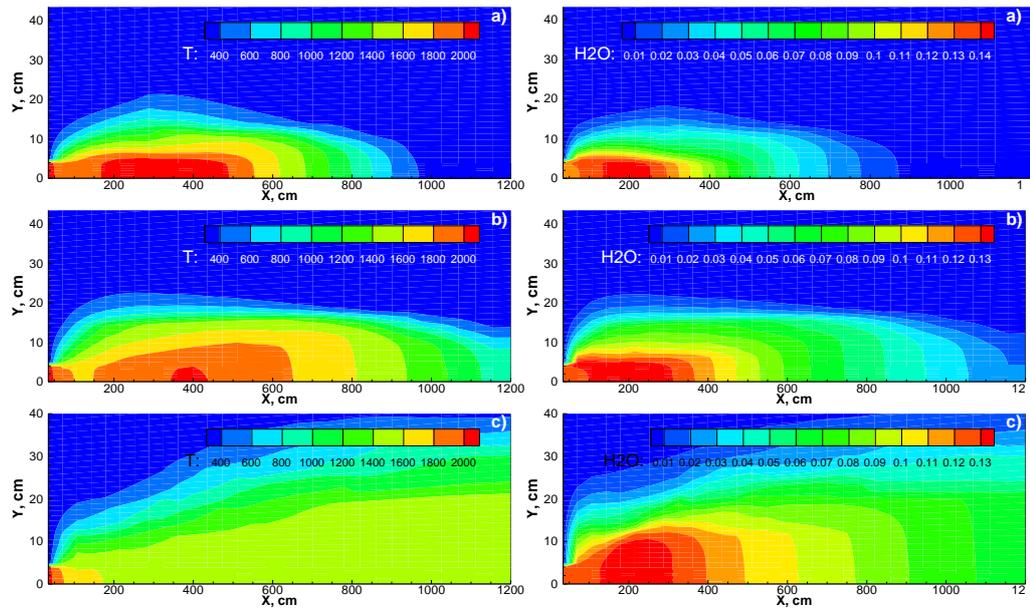


Рис. 81 Пространственные распределения температуры (слева) и массовой доли H₂O, рассчитанные на высотах Н = 5 km (a), Н = 10 km (b), Н = 20 km (c).

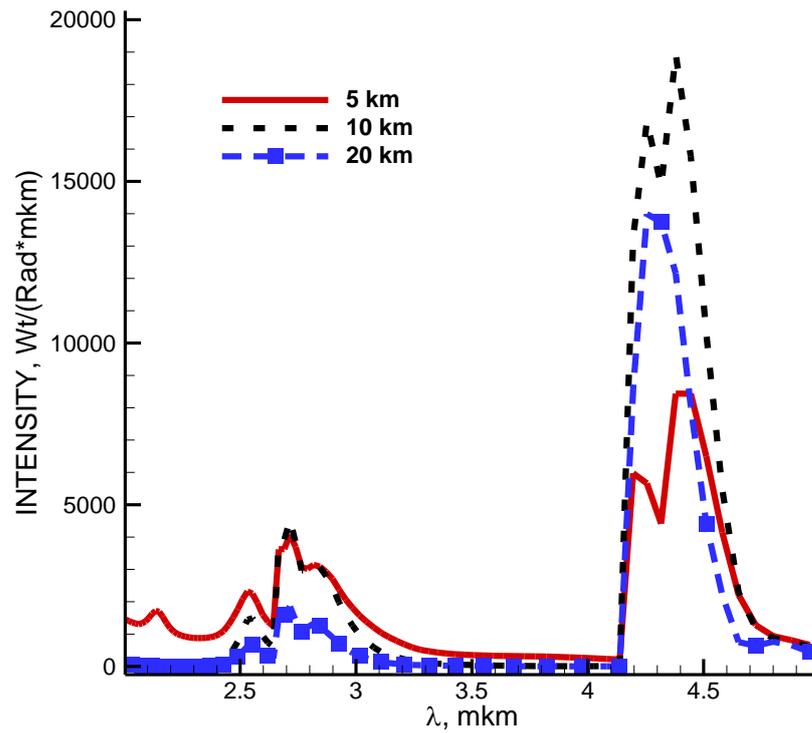


Рис. 82 Спектральная сигнатура струи тактической ракеты на разных высотах.

Спектральная сигнатура струи продуктов сгорания PH Atlas

Табл. 29 Исходные данные численного моделирования.

	Спутный поток	Выход сопла
Скорость (м/с)	1476	2960
Давление (Па)	278	68850
Температура (К)	251	2230
Массовая доля:		
CO ₂	0.000458	0.302262
H ₂ O	0.000000	0.272443
CO	0.000000	0.412135
N ₂	0.766388	0.000000
O ₂	0.233154	0.000028
H ₂	0.000000	0.012194
OH	0.000000	0.000797
O	0.000000	0.000014
H	0.000000	0.000127

В данном разделе приводятся результаты численного моделирования струи продуктов сгорания PH Atlas. Граничные условия, задаваемые на выходе сопла и в спутном потоке, представлены в Табл. 29.[155]

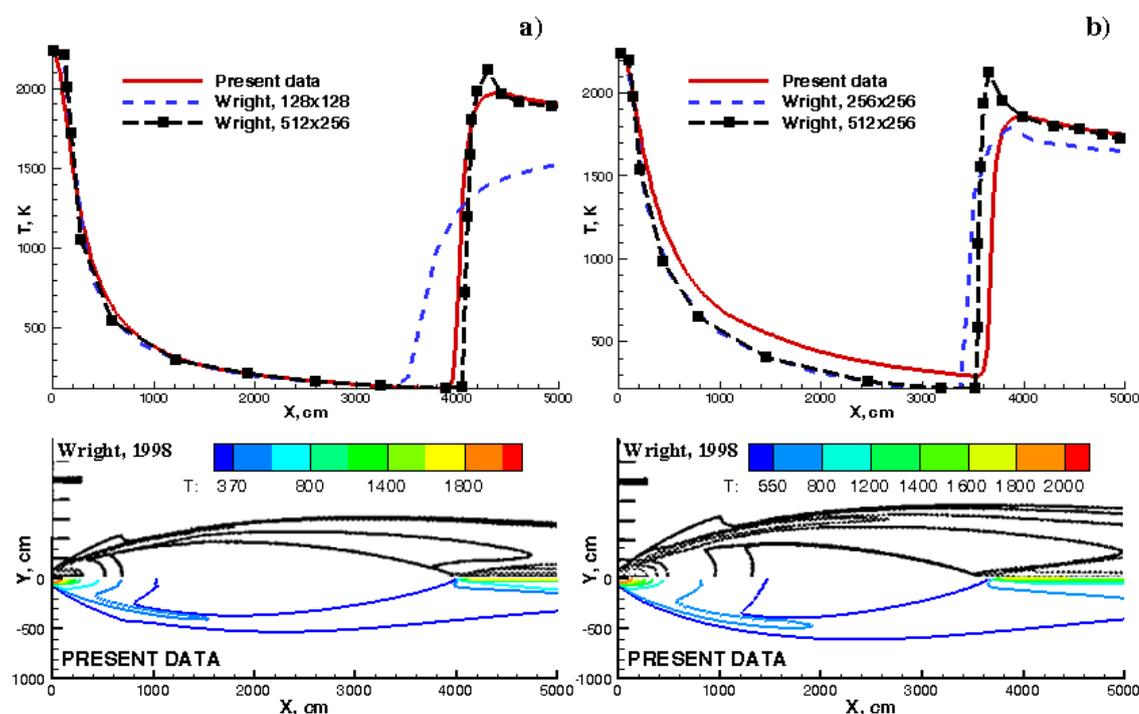


Рис. 83 Сравнение осевого(вверху) и пространственного (внизу) распределения температуры в струе продуктов сгорания с данными [155] для совершенного (а) и химически реагирующего газа (б).

Пространственное распределение температуры и давления в струе продуктов сгорания РН Atlas представлены на Рис. 68 и Рис. 69. На Рис. 83 показано сравнение расчетных данных по осевому и двумерному распределению температуры, рассчитанной с учетом и без учета химических превращений, с данными [155]. Видно, что полученные результаты демонстрируют удовлетворительное согласие с данными [155], как для модели совершенного, так и для химически реагирующего газа. В данной главе (как и в работе [155]) численное моделирование струи продуктов сгорания проводилось без учета турбулентности. В работе [155] не рассчитывалась сигнатура струи продуктов сгорания РН Atlas, но она рассчитывалась в работе [156] для осесимметричной турбулентной струи продуктов сгорания. Сравнение данных полученных в данной работе с данными [156] показано на Рис. 84. Расхождение данных возможно обусловлено наличием турбулентного слоя смешения в результатах работы [156].

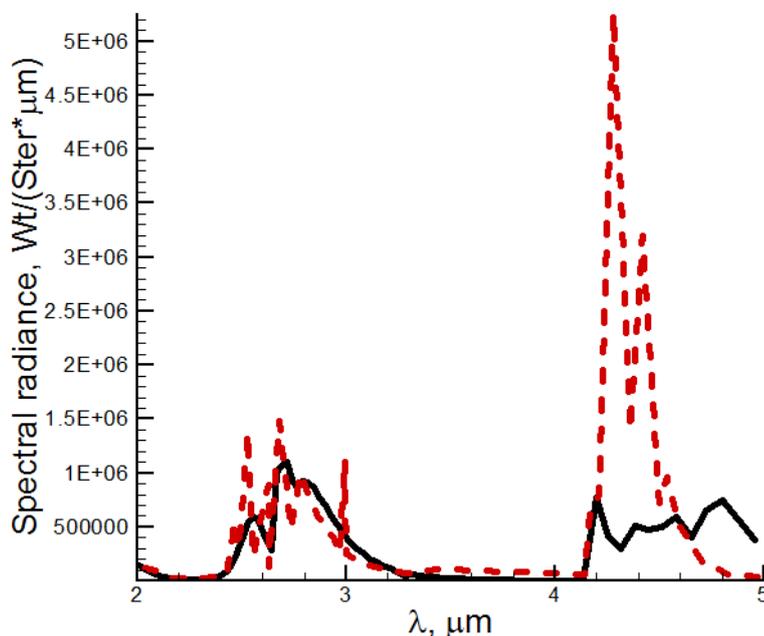


Рис. 84 Сравнение спектральной сигнатуры струи продуктов сгорания РН Atlas с данными [156].

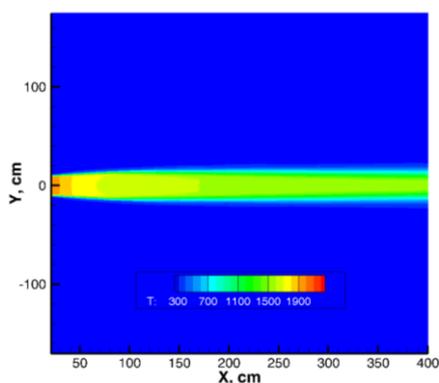
6.3. Результаты расчета спектральной излучательной способности (сигнатуры) струи продуктов сгорания ГПВРД

Табл. 30 Исходные данные численного моделирования.

	Спутный поток	Выход сопла
Скорость (м/с)	2000	750
Давление (атм)	0.55	0.33
Температура (К)	217	2000
Массовая доля:		
CO ₂	0.000458	0.23
H ₂ O	0.000000	0.13
CO	0.000000	0.20
N ₂	0.766388	0.000000
O ₂	0.233154	0.000028

В данном разделе исследовалась спектральная излучательная способность струи продуктов сгорания, истекающей из сопла модельного ГПВРД. Начальные данные (параметры на выходе сопла) были взяты из расчетов исследовательской камеры SCHOLAR [157]. В качестве исходных данных для численного моделирования струи продуктов сгорания брались осредненные по сечению значения давления, температуры, массовых долей химических компонент продуктов сгорания. Эти данные приведены в Табл. 30.

a)



b)

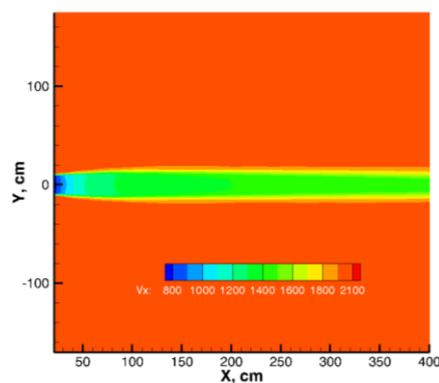


Рис. 85 Пространственные распределения температуры и продольной скорости в струе продуктов сгорания.

Результаты численного моделирования струи продуктов сгорания приведены на Рис. 85.

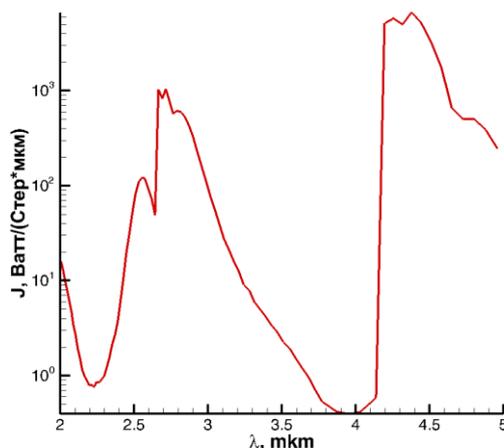


Рис. 86 Спектральная излучательная способность струи продуктов сгорания, истекающая из сопла ГПВРД.

На Рис. 86 приведена рассчитанная сигнатура струи продуктов сгорания, истекающих из сопла ГПВРД. На графике присутствуют два локальных максимума, соответствующих излучению CO_2/CO ($\lambda = 4 - 5$ мкм) и $\text{H}_2\text{O}/\text{CO}_2$ ($\lambda = 2.5 - 3.5$ мкм), а интенсивность излучения по порядку величины соответствует интенсивности излучения струи продуктов сгорания тактической ракеты.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные результаты исследований, выполненных в диссертационной работе, сводятся к следующему:

1. Разработана согласованная модель механики тлеющего разряда, основанная на решении двумерной диффузионно-дрейфовой системы уравнений для расчета электродинамической структуры разряда, решении кинетического уравнения Больцмана для функции распределения электронов для нахождения коэффициентов переноса в плазме и констант скорости, а также решении системы уравнений поуровневой кинетики для расчета компонентного состава плазмы тлеющего разряда. Проведены численные исследования электродинамической структуры тлеющего и пеннинговского разрядов с использованием решения системы уравнений физической механики. Выполненное исследование двумерной структуры нормального тлеющего разряда позволило установить ряд особенностей, связанных с физико-химической кинетикой. Было показано, что при давлении порядка нескольких Тор использование решения кинетического уравнения Больцмана при расчете 1-го коэффициента Таунсенда приводит к росту плотности ионов и электронов на катоде и в положительном столбе тлеющего разряда.
2. Разработана структурированная база данных констант скоростей и сечений рассеяния на молекулах и атомах водорода для процессов, протекающих в плазме газовых разрядов. Разработаны подробная уровневая и упрощенная кинетические модели для расчета концентрации молекулярных и атомарных ионов водорода в плазме пеннинговского разряда. Выполнены расчеты компонентного состава пеннинговского разряда с использованием разработанных кинетических моделей. На основе выполненных расчетов была разработана упрощенная кинетическая схема, позволяющая рассчитывать концентрацию молекулярных и атомарных ионов в плазме пеннинговского разряда.

3. Разработана квазимаршевая методика решения системы уравнений движения вязкого теплопроводного химически реагирующего газа в задачах истекания струи продуктов сгорания из сопла ГЛА и разработана параллельная версия компьютерного кода, решающего данную задачу. Это позволило значительно сократить время расчетов. С использованием разработанной методики рассчитаны струи продуктов сгорания, истекающих из сопла тактической ракеты, РН Atlas, РН Titan и ГЛА X-51.
4. Разработана серия собственных (авторских) компьютерных кодов, предназначенных для численного моделирования неравновесных физико-химических процессов в механике газовых разрядов и струй продуктов сгорания (программы расчета: функции распределения электронов по энергиям и коэффициентов переноса в плазме газового тлеющего и пенниговского разрядов, компонентного состава плазмы, двухмерной электродинамической структуры разряда, параметров в струе продуктов сгорания ГЛА на основе двухмерных и трехмерных моделей, спектральной излучательной способности струи продуктов сгорания ГЛА).
5. Проведены многопараметрические расчеты спектральной излучательной способности струй продуктов сгорания, истекающих из сопел твердотопливных (тактическая ракета) и жидкостных (РН Atlas, РН Titan) ракетных двигателей, а также прогностические расчеты сигнатуры гиперзвукового летательного аппарата (ГЛА X-51).

Автор выражает благодарность научному руководителю, д.ф.-м.н., проф., академику РАН С.Т. Суржикову, за постоянное внимание, ценные советы и большую помощь в подготовке работы. Автор благодарит коллективы лаборатории радиационной газовой динамики Института проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН и Федерального государственного унитарного предприятия «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики имени Н.Л. Духова», а также коллектив кафедры физической и химической

механики Московского физико-технического института за многолетнее сотрудничество, плодотворные обсуждения и полезные замечания, сделанные при подготовке диссертации.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Х. А. Лоренц, *Теория электронов и ее применение к явлениям света и теплового излучения*. Гос. изд-во технико-теорет. лит-ры, 1956.
- [2] Ю. П. Райзер, *Физика газового разряда*. Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987.
- [3] Б. Зельдович и Ю. Райзер, *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений*. Рипол Классик, 2013.
- [4] Ю. П. Райзер и С. Т. Суржиков, «Диффузия зарядов вдоль тока и эффективный метод устранения счетной диффузии при расчетах разрядов типа тлеющего», *Теплофизика Высоких Температур*, т. 28, вып. 3, сс. 439–443, 1990.
- [5] С. Т. Суржиков, *Физическая механика газовых разрядов*. федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования" Московский государственный технический университет имени НЭ Баумана (национальный исследовательский университет)", 2006.
- [6] Н. Л. Александров, А. П. Напартович, и А. Н. Старостин, «Электронные кинетические коэффициенты в слабоионизованной плазме при наличии сильного прилипания», *Физика Плазмы*, т. 6, вып. 5, 1980.
- [7] M. J. Druyvesteyn и F. M. Penning, «The mechanism of electrical discharges in gases of low pressure», *Rev. Mod. Phys.*, т. 12, вып. 2, с. 87, 1940.
- [8] A. M. Cravath, «AM Cravath, *Phys. Rev.* 36, 248 (1930).», *Phys Rev*, т. 36, с. 248, 1930.
- [9] A. M. Cravath и L. B. Loeb, «The mechanism of the high velocity of propagation of lightning discharges», *Physics*, т. 6, вып. 4, сс. 125–127, 1935.
- [10] J. Hirschfelder, R. B. Bird, и C. F. Curtiss, «Molecular theory of gases and liquids», 1964.
- [11] W. P. Allis, «Motions of ions and electrons», в *Electron-Emission Gas Discharges I/Elektronen-Emission Gasentladungen I*, Springer, 1956, сс. 383–444.
- [12] W. P. Allis, «Semidivergence of the Legendre expansion of the Boltzmann equation», *Phys. Rev. A*, т. 26, вып. 3, с. 1704, 1982.
- [13] T. Holstein, «Energy distribution of electrons in high frequency gas discharges», *Phys. Rev.*, т. 70, вып. 5–6, с. 367, 1946.
- [14] А. В. Тимофеев, «О ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЯХ ПЕРЕНОСА ДЛЯ СЛАБОИОНИЗИРОВАННОЙ ПЛАЗМЫ ГАЗОВОГО РАЗРЯДА», *Журнал Технической Физики*, т. 40, с. 192, 1970.
- [15] Н. Л. Александров, А. П. Напартович, и А. Н. Старостин, «Уравнения переноса электронов в неравновесной слабоионизованной плазме в электрическом и магнитном полях», *Физика Плазмы*, т. 9, вып. 5, 1983.
- [16] Н. Л. Александров, А. П. Напартович, и А. Н. Старостин, «Электронные коэффициенты переноса в неравновесной слабоионизованной плазме в электрическом и магнитном полях», *Журнал Прикладной Механики И Технической Физики*, вып. 3, 1983.

- [17] J. J. Lowke, J. H. Parker Jr, и С. А. Hall, «Electron diffusion under the influence of an electric field near absorbing boundaries», *Phys. Rev. A*, т. 15, вып. 3, с. 1237, 1977.
- [18] J. H. Parker Jr и J. J. Lowke, «Theory of electron diffusion parallel to electric fields. I. Theory», *Phys. Rev.*, т. 181, вып. 1, с. 290, 1969.
- [19] L. C. Pitchford и A. V. Phelps, «Comparative calculations of electron-swarm properties in N₂ at moderate E/N values», *Phys. Rev. A*, т. 25, вып. 1, с. 540, 1982.
- [20] A. V. Phelps и L. C. Pitchford, «Anisotropic scattering of electrons by N₂ and its effect on electron transport», *Phys. Rev. A*, т. 31, вып. 5, с. 2932, 1985.
- [21] W. L. Nighan, «Electron Energy Distributions and Collision Rates in Electrically Excited N₂, CO, and CO₂», *Phys. Rev. A*, т. 2, вып. 5, с. 1989, 1970.
- [22] N. L. Aleksandrov и I. V. Kochetov, «Electron transport parameters in a weakly ionized gas with vibrationally excited molecules», *J. Phys. Appl. Phys.*, т. 26, вып. 3, с. 387, 1993.
- [23] V. I. Kolobov и V. A. Godyak, «Nonlocal electron kinetics in collisional gas discharge plasmas», *IEEE Trans. Plasma Sci.*, т. 23, вып. 4, сс. 503–531, 1995.
- [24] Л. Д. Цендин, «Нелокальная кинетика электронов в газоразрядной плазме», *Успехи Физических Наук*, т. 180, вып. 2, сс. 139–164, 2010.
- [25] G. J. M. Hagelaar и L. C. Pitchford, «Solving the Boltzmann equation to obtain electron transport coefficients and rate coefficients for fluid models», *Plasma Sources Sci. Technol.*, т. 14, вып. 4, с. 722, 2005.
- [26] А. В. Бодронов, К. А. Верещагин, О. А. Гордеев, В. В. Смирнов, и В. А. Шахатов, «О возможности локальной невозмущающей диагностики электронного компонента в плазме тлеющего разряда в азоте методом спектроскопии КАРС», *Теплофизика Высоких Температур*, т. 34, вып. 5, сс. 666–675, 1996.
- [27] Н. Л. Александров, А. М. Кончаков, и Э. Е. Сон, «Функция распределения электронов и кинетические коэффициенты азотной плазмы», *Физика Плазмы*, т. 4, вып. 1, 1978.
- [28] Н. Л. Александров, А. М. Кончаков, и Э. Е. Сон, «Функция распределения электронов и кинетические коэффициенты азотной плазмы. II. Колебательно-возбужденные молекулы», *Физика Плазмы*, т. 4, вып. 5, сс. 1182–1187, 1978.
- [29] Л. С. Полак и Д. И. Словецкий, «Энергетическое распределение электронов в тлеющем разряде в молекулярных газах», *Теплофизика Высоких Температур*, т. 9, вып. 6, сс. 1151–1158, 1971.
- [30] H. Leyh, D. Loffhagen, и R. Winkler, «A new multi-term solution technique for the electron Boltzmann equation of weakly ionized steady-state plasmas», *Comput. Phys. Commun.*, т. 113, вып. 1, сс. 33–48, 1998.
- [31] S. Dujko и R. D. White, «A multi term Boltzmann equation analysis of non-conservative electron transport in time-dependent electric and magnetic fields», в *Journal of Physics: conference series*, 2008, т. 133, с. 012005.

- [32] В. М. Гольдфарб, Е. В. Ильина, И. Е. Костыгова, Г. А. Лукьянов, и В. А. Силантьев, «О заселенности уровней водорода в аргоно-водородной плазменной струе», *Оптика И Спектроскопия*, т. 20, вып. 6, сс. 1085–1086, 1966.
- [33] Г. А. Лукьянов, «Сверхзвуковые струи плазмы», *Л Машиностроение*, 1985.
- [34] I. D. Boyd, «Numerical modeling of spacecraft electric propulsion thrusters», *Prog. Aerosp. Sci.*, т. 41, вып. 8, сс. 669–687, 2005.
- [35] I. D. Boyd, «Monte Carlo simulation of nonequilibrium flow in a low-power hydrogen arcjet», *Phys. Fluids*, т. 9, вып. 10, сс. 3086–3095, 1997.
- [36] M. J. De Graaf, R. Severens, R. P. Dahiya, M. C. M. Van De Sanden, и D. C. Schram, «Anomalous fast recombination in hydrogen plasmas involving rovibrational excitation», *Phys. Rev. E*, т. 48, вып. 3, с. 2098, 1993.
- [37] S. Mazouffre, P. Vankan, R. Engeln, и D. C. Schram, «Influence of surface chemistry on the transport of H atoms in a supersonic hydrogen plasma jet», *Phys. Plasmas*, т. 8, вып. 8, сс. 3824–3832, 2001.
- [38] Z. Qing, D. K. Otorbaev, G. J. H. Brussaard, M. C. M. Van de Sanden, и D. C. Schram, «Diagnostics of the magnetized low-pressure hydrogen plasma jet: Molecular regime», *J. Appl. Phys.*, т. 80, вып. 3, сс. 1312–1324, 1996.
- [39] S. E. Selezneva, M. I. Boulos, M. C. M. Van De Sanden, R. Engeln, и D. C. Schram, «Stationary supersonic plasma expansion: continuum fluid mechanics versus direct simulation Monte Carlo method», *J. Phys. Appl. Phys.*, т. 35, вып. 12, с. 1362, 2002.
- [40] S. E. Selezneva, M. I. Boulos, K. G. Y. Letourneur, M. van Hest, M. C. M. van de Sanden, и D. C. Schram, «Supersonically expanding cascaded arc plasma properties: comparison of Ne, Ar and Xe», *Plasma Sources Sci. Technol.*, т. 12, вып. 1, с. 107, 2003.
- [41] R. F. G. Meulenbroeks *и др.*, «The argon-hydrogen expanding plasma: model and experiments», *Plasma Sources Sci. Technol.*, т. 4, вып. 1, с. 74, 1995.
- [42] A. Laricchiuta, R. Celiberto, F. Esposito, и M. Capitelli, «State-to-state cross sections for H₂ and its isotopic variants», *Plasma Sources Sci. Technol.*, т. 15, вып. 2, с. S62, 2006.
- [43] A. Laricchiuta, R. Celiberto, и R. K. Janev, «Electron-impact-induced allowed transitions between triplet states of H₂», *Phys. Rev. A*, т. 69, вып. 2, с. 022706, 2004.
- [44] R. Celiberto, R. K. Janev, A. Laricchiuta, M. Capitelli, J. M. Wadehra, и D. E. Atems, «Cross section data for electron-impact inelastic processes of vibrationally excited molecules of hydrogen and its isotopes», *At. Data Nucl. Data Tables*, т. 77, вып. 2, сс. 161–213, 2001.
- [45] K. Sawada и T. Fujimoto, «Effective ionization and dissociation rate coefficients of molecular hydrogen in plasma», *J. Appl. Phys.*, т. 78, вып. 5, сс. 2913–2924, 1995.
- [46] R. A. Stubbers, «TWO-DIMENSIONAL MODELLING OF A RADIALLY-CONVERGENT CYLINDRICAL INERTIAL ELECTROSTATIC CONFINEMENT (IEC) FUSION DEVICE», 1994.

- [47] J. Bretagne, G. Delouya, C. Gorse, M. Capitelli, и M. Bacal, «Electron energy distribution functions in electron-beam-sustained discharges: application to magnetic multicusp hydrogen discharges», *J. Phys. Appl. Phys.*, т. 18, вып. 5, сс. 811–825, 1985.
- [48] U. Kortshagen и В. Heil, «Kinetic two-dimensional modeling of inductively coupled plasmas based on a hybrid kinetic approach», *Plasma Sci. IEEE Trans.* ..., т. 27, вып. 5, сс. 1297–1309, 1999.
- [49] U. Kortshagen, A. Maresca, К. Orlov, и В. Heil, «Recent progress in the understanding of electron kinetics in low-pressure inductive plasmas», *Appl. Surf. Sci.*, т. 192, вып. 1, сс. 244–257, 2002.
- [50] Matveyev A. A. и S. V. P., «Kinetic processes in a highly-ionized non-equilibrium hydrogen plasma», *Plasma Sources Sci. Technol.*, т. 4, вып. 4, сс. 606–617, 1995.
- [51] R. Celiberto, A. Laricchiuta, M. Capitelli, R. K. Janev, J. M. Wadehra, и D. E. Atems, «Cross section data for electron-impact inelastic processes of vibrationally excited hydrogen molecules and their isotopes», 1999.
- [52] R. Celiberto и R. K. Janev, «ANALYTICAL REPRESENTATION OF ELECTRON IMPACT EXCITATION CROSS SECTIONS OF VIBRATIONALLY EXCITED H₂ AND D₂ MOLECULES», 1995.
- [53] C. Gorse, M. Capitelli, J. Bretagne, и M. Bacal, «Vibrational excitation and negative-ion production in magnetic multicusp hydrogen discharges», *Chem. Phys.*, т. 93, вып. 1, сс. 1–12, 1985.
- [54] C. Gorse, M. Capitelli, M. Bacal, J. Bretagne, и A. Laganà, «Progress in the non-equilibrium vibrational kinetics of hydrogen in magnetic multicusp H⁻ ion sources», *Chem. Phys.*, т. 117, вып. 2, сс. 177–195, окт. 1987.
- [55] R. Celiberto, M. Cacciatore, M. Capitelli, и C. Gorse, «Electron impact direct dissociation processes of vibrationally excited H₂ molecules to excited atomic hydrogen H*(n=1–5). I. CROSS SECTIONS», *Chem. Phys.*, т. 133, вып. 3, сс. 355–367, 1989.
- [56] M. Capitelli *и др.*, «Non-equilibrium plasma kinetics: a state-to-state approach», *Plasma Sources Sci. Technol.*, т. 16, вып. 1, сс. S30–S44, фев. 2007.
- [57] M. Capitelli *и др.*, «Thermodynamics, Transport and Kinetics of Equilibrium and Non-Equilibrium Plasmas: A State-to-State Approach», *Plasma Chem. Plasma Process.*, т. 32, вып. 3, сс. 427–450, дек. 2011.
- [58] M. Capitelli *и др.*, «Vibrational kinetics, electron dynamics and elementary processes in H₂ and D₂ plasmas for negative ion production: modelling aspects», *Nucl. Fusion*, т. 46, вып. 6, сс. S260–S274, июн. 2006.
- [59] J. Loureiro и С. М. Ferreira, «Electron and vibrational kinetics in the hydrogen positive column», *J. Phys. Appl. Phys.*, т. 22, вып. 11, сс. 1680–1691, 1989.
- [60] A. Girard, С. Lécot, и К. Serebrennikov, «Numerical simulation of the plasma of an electron cyclotron resonance ion source», *J. Comput. Phys.*, т. 191, вып. 1, сс. 228–248, окт. 2003.
- [61] N. Takado *и др.*, «Numerical Analysis of the Hydrogen Atom Density in a Negative Ion Source», *AIP Conf. Proc.*, т. 925, вып. 2007, сс. 38–45, 2007.

- [62] N. Takado *и др.*, «Numerical analysis of the production profile of H⁰ atoms and subsequent H⁻ ions in large negative ion sources», *J. Appl. Phys.*, т. 103, вып. 5, с. 053302, 2008.
- [63] R. Terasaki, I. Fujino, a Hatayama, T. Mizuno, и T. Inoue, «3D modeling of the electron energy distribution function in negative hydrogen ion sources.», *Rev. Sci. Instrum.*, т. 81, вып. 2, с. 02A703, фев. 2010.
- [64] G. J. M. Hagelaar, G. Fubiani, и J.-P. Boeuf, «Model of an inductively coupled negative ion source: I. General model description», *Plasma Sources Sci. Technol.*, т. 20, вып. 1, с. 015001, фев. 2011.
- [65] J. P. Boeuf, G. J. M. Hagelaar, P. Sarrailh, G. Fubiani, и N. Kohen, «Model of an inductively coupled negative ion source: II. Application to an ITER type source», *Plasma Sources Sci. Technol.*, т. 20, вып. 1, с. 015002, фев. 2011.
- [66] I. Méndez, G.-V. F. J., V. J. Herrero, и I. Tanarro, «Atom and Ion Chemistry in Low Pressure Hydrogen DC Plasmas», *J. Phys. Chem. A*, т. 110, вып. 18, сс. 6060–6066, 2006.
- [67] F. Taccogna, R. Schneider, S. Longo, и M. Capitelli, «Modeling of a negative ion source. I. Gas kinetics and dynamics in the expansion region», *Phys. Plasmas*, т. 14, вып. 7, с. 073503, 2007.
- [68] F. Taccogna, R. Schneider, S. Longo, и M. Capitelli, «Modeling of a negative ion source. II. Plasma-gas coupling in the extraction region», *Phys. Plasmas*, т. 15, вып. 10, с. 103502, 2008.
- [69] O. Fukumasa *и др.*, «Isotope Effect of H⁻/D⁻ Volume Production in Low-Pressure H₂/D₂ Plasmas— Measurement of VUV Emissions and Negative Ion Densities», *Contrib. Plasma Phys.*, т. 44, вып. 5–6, сс. 516–522, сен. 2004.
- [70] M. Bacal, A. Hatayama, и J. Peters, «Volume production negative hydrogen ion sources», *IEEE Trans. Plasma Sci.*, т. 33, вып. 6, сс. 1845–1871, дек. 2005.
- [71] K. G. Tschersich, «Intensity of a source of atomic hydrogen based on a hot capillary», *J. Appl. Phys.*, т. 87, вып. 5, с. 2565, 2000.
- [72] M. Bacal, «Physics aspects of negative ion sources», *Nucl. Fusion*, т. 46, вып. 6, сс. S250–S259, июн. 2006.
- [73] W. B. Nottingham, R. Kollath, W. P. Allis, P. F. Little, и R. H. Good, «Handbuch der Physik», 1956.
- [74] Д. А. Сторожев, «Кинетические процессы в плазме тлеющего разряда», *Физико-Химическая Кинетика В Газовой Динамике*, т. 14, вып. 3, сс. 7–7, 2013.
- [75] B. Sherman, «The difference-differential equation of electron energy distribution in a gas», *J. Math. Anal. Appl.*, т. 1, вып. 3–4, сс. 342–354, 1960.
- [76] L. S. Frost и A. V. Phelps, «Rotational excitation and momentum transfer cross sections for electrons in H₂ and N₂ from transport coefficients», *Phys. Rev.*, т. 127, вып. 5, с. 1621, 1962.
- [77] D. L. Scharfetter и H. K. Gummel, «Large-signal analysis of a silicon read diode oscillator», *IEEE Trans. Electron Devices*, т. 16, вып. 1, сс. 64–77, 1969.
- [78] G. J. Schulz, «Vibrational excitation of nitrogen by electron impact», *Phys. Rev.*, т. 125, вып. 1, с. 229, 1962.

- [79] G. J. Schulz, «Vibrational excitation of N₂, CO, and H₂ by electron impact», *Phys. Rev.*, т. 135, вып. 4A, с. A988, 1964.
- [80] J. C. Y. Chen, «Anharmonicity effects in vibrational excitation of molecules by slow electron impact», *Phys. Lett.*, т. 8, вып. 3, сс. 183–184, 1964.
- [81] N. A. Dyatko, I. V. Kochetov, и А. Р. Napartovich, «Electron energy distribution function in decaying nitrogen plasmas», *J. Phys. Appl. Phys.*, т. 26, вып. 3, с. 418, 1993.
- [82] A. G. Robertson, M. T. Elford, R. W. Crompton, M. A. Morrison, W. Sun, и W. K. Trail, «Rotational and vibrational excitation of nitrogen by electron impact», *Aust. J. Phys.*, т. 50, вып. 3, сс. 441–472, 1997.
- [83] V. Guerra, P. A. Sá, и J. Loureiro, «Kinetic modeling of low-pressure nitrogen discharges and post-discharges», *Eur. Phys. J.-Appl. Phys.*, т. 28, вып. 2, сс. 125–152, 2004.
- [84] G. J. M. Hagelaar, «BOLSIG+: User-friendly solver for electron Boltzmann equation», *Download Available Httpwww Laplace Univ-Tlse Fr*, 2008.
- [85] S. T. Surzhikov и J. S. Shang, «Two-component plasma model for two-dimensional glow discharge in magnetic field», *J. Comput. Phys.*, т. 199, вып. 2, сс. 437–464, сен. 2004.
- [86] S. T. Surzhikov, *Computational physics of electric discharges in gas flows*, т. 7. Walter de Gruyter, 2013.
- [87] J. S. Townsend и V. A. Bailey, «XCVII. The motion of electrons in gases», *Lond. Edinb. Dublin Philos. Mag. J. Sci.*, т. 42, вып. 252, сс. 873–891, 1921.
- [88] С. Браун, *Элементарные процессы в плазме газового разряда*. Госатомиздат, 1961.
- [89] R. N. Schwartz, Z. I. Slawsky, и К. F. Herzfeld, «Calculation of vibrational relaxation times in gases», *J. Chem. Phys.*, т. 20, вып. 10, сс. 1591–1599, 1952.
- [90] J. Keck и G. Carrier, «Diffusion theory of nonequilibrium dissociation and recombination», *J. Chem. Phys.*, т. 43, вып. 7, сс. 2284–2298, 1965.
- [91] В. В. Русанов, В. П. Силаков, и А. В. Чеботарев, «Кинетические характеристики процесса нагрева молекулярного азота, протекающего во время неравновесного электрического разряда и в после разрядный период», *Препринты Института Прикладной Математики Им МВ Келдыша РАН*, вып. 0, сс. 42–28, 2004.
- [92] М. Капителли, «Неравновесная колебательная кинетика», 1989.
- [93] R. K. Janev, *Atomic and molecular processes in fusion edge plasmas*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [94] K. Ikeda и др., «Recent Studies of Hydrogen Negative Ion Source and Beam Production for NBI in Large Helical Device», *Plasma Fusion Res.*, т. 11, сс. 2505038–2505038, 2016.
- [95] S. Surzhikov и D. Storozhev, «Numerical simulation of dissociation kinetics in the Penning discharge plasma using 2D modified drift-diffusion model», в *55th AIAA Aerospace Sciences Meeting*, American Institute of Aeronautics and Astronautics.

- [96] S. Surzhikov и D. Storozhev, «Numerical Simulation of Two-Dimensional Structure of Glow Discharge in Molecular Hydrogen», в *45th AIAA Thermophysics Conference*, 2015, с. 3108.
- [97] D. A. Storozhev и S. T. Surzhikov, «Numerical simulation of the two-dimensional structure of glow discharge in molecular nitrogen in light of vibrational kinetics», *High Temp.*, т. 53, вып. 3, сс. 307–318, 2015.
- [98] D. Storozhev и S. Surzhikov, «Numerical Simulation of Two-Dimensional Structure of Glow Discharge considering kinetics», в *52nd Aerospace Sciences Meeting*, 2014, с. 1193.
- [99] J. P. England, M. T. Elford, и R. W. Crompton, «A Study of the Vibrational Excitation of H₂ by Measurements of the Drift Velocity of Electrons in H₂- Ne Mixtures», *Aust. J. Phys.*, т. 41, вып. 4, сс. 573–586, 1988.
- [100] M. Capitelli, R. Celiberto, F. Esposito, A. Laricchiuta, K. Hassouni, и S. Longo, «Elementary processes and kinetics of H₂ plasmas for different technological applications», *Plasma Sources Sci. Technol.*, т. 11, вып. 3A, сс. A7–A25, 2002.
- [101] F. Taccogna, R. Schneider, S. Longo, и M. Capitelli, «Modeling of a negative ion source. I. Gas kinetics and dynamics in the expansion region», *Phys. Plasmas*, т. 14, вып. 7, с. 073503, 2007.
- [102] F. Taccogna, R. Schneider, S. Longo, и M. Capitelli, «Modeling of a negative ion source. II. Plasma-gas coupling in the extraction region», *Phys. Plasmas*, т. 15, вып. 10, с. 103502, 2008.
- [103] H. Ehrhardt, L. Langhans, F. Linder, и H. S. Taylor, «Resonance scattering of slow electrons from H₂ and CO angular distributions», *Phys. Rev.*, т. 173, вып. 1, с. 222, 1968.
- [104] H. Nishimura, A. Danjo, и H. Sugahara, «Differential Cross Sections of Electron Scattering from Molecular Hydrogen I. Elastic Scattering and Vibrational Excitation ($X\ 1\ \Sigma^+ g, v=0 \rightarrow 1$)», *J. Phys. Soc. Jpn.*, т. 54, вып. 5, сс. 1757–1768, 1985.
- [105] M. Allan, «Experimental observation of structures in the energy dependence of vibrational excitation in H₂ by electron impact in the $2\Sigma u^+$ resonance region», *J. Phys. B At. Mol. Phys.*, т. 18, вып. 13, с. L451, 1985.
- [106] S. E. Branchett, J. Tennyson, и L. A. Morgan, «Electronic excitation of molecular hydrogen using the R-matrix method», *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.*, т. 23, вып. 24, с. 4625, 1990.
- [107] M. A. Khakoo, S. Trajmar, R. McAdams, и T. W. Shyn, «Electron-impact excitation cross sections for the $b\ \Sigma u^+ 3$ state of H₂», *Phys. Rev. A*, т. 35, вып. 7, с. 2832, 1987.
- [108] M. A. Khakoo и S. Trajmar, «Electron-impact excitation of the $a\ \Sigma g^+ 3$, $B\ \Sigma u^+ 1$, $c\ \Pi u 3$, and $C\ \Pi u 1$ states of H₂», *Phys. Rev. A*, т. 34, вып. 1, с. 146, 1986.
- [109] B. P. Lavrov, V. N. Ostrovsky, и V. I. Ustimov, «Non-Franck-Condon transitions in the electron impact excitation of molecules. II. Semi-empirical approach: transitions in H₂», *J. Phys. B At. Mol. Phys.*, т. 14, вып. 23, с. 4701, 1981.

- [110] S. Chung и С. С. Lin, «Application of the close-coupling method to excitation of electronic states and dissociation of H₂ by electron impact», *Phys. Rev. A*, т. 17, вып. 6, с. 1874, 1978.
- [111] J. M. Ajello, D. Shemansky, T. L. Kwok, и Y. L. Yung, «Studies of extreme-ultraviolet emission from Rydberg series of H₂ by electron impact», *Phys. Rev. A*, т. 29, вып. 2, с. 636, 1984.
- [112] G. P. Arrighini, F. Biondi, и С. Guidotti, «A study of the inelastic scattering of fast electrons from molecular hydrogen», *Mol. Phys.*, т. 41, вып. 6, сс. 1501–1514, 1980.
- [113] H. Tawara, Y. Itikawa, H. Nishimura, и M. Yoshino, «Cross sections and related data for electron collisions with hydrogen molecules and molecular ions», *J. Phys. Chem. Ref. Data*, т. 19, вып. 3, сс. 617–636, 1990.
- [114] D. Mathur, S. U. Khan, и J. B. Hasted, «Collision processes of electrons with molecular hydrogen ions», *J. Phys. B At. Mol. Phys.*, т. 12, вып. 12, с. 2043, 1979.
- [115] J. Geddes, R. W. McCullough, A. Donnelly, и H. B. Gilbody, «Dissociation of hydrogen in high-frequency discharges», *Plasma Sources Sci. Technol.*, т. 2, вып. 2, с. 93, 1993.
- [116] M. Capitelli, R. Celiberto, A. Eletskii, и A. Laricchiuta, «Electron-Molecule Dissociation Cross-Sections of H₂, N₂, and O₂ in Different Vibrational Levels», *At. Plasma-Mater. Interact. Data Fusion IAEA*, т. 9, сс. 47–64, 2001.
- [117] P. S. Krstic и D. R. Schultz, «Elastic and vibrationally inelastic slow collisions: H⁺ H₂, H⁺⁺ H₂», *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.*, т. 32, вып. 10, с. 2415, 1999.
- [118] P. S. Krstić и D. R. Schultz, «Elastic processes involving vibrationally excited molecules in cold hydrogen plasmas», *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.*, т. 36, вып. 2, с. 385, 2003.
- [119] Д. А. Сторожев, «Численное моделирование кинетики ионизации и диссоциации водорода в плазме разряда Пеннинга в приближении ЛТР», *Физико-Химическая Кинетика В Газовой Динамике*, т. 15, вып. 3, сс. 3–3, 2014.
- [120] Д. А. Сторожев, С. Т. Суржиков, и С. Е. Куратов, «Анализ кинетических процессов в тлеющем разряде в молекулярном водороде», *Физико-Химическая Кинетика В Газовой Динамике*, т. 15, вып. 6, сс. 7–7, 2014.
- [121] I. Mendez, F. J. Gordillo-Vazquez, V. J. Herrero, и I. Tamarro, «Atom and ion chemistry in low pressure hydrogen DC plasmas», *J. Phys. Chem. A*, т. 110, вып. 18, сс. 6060–6066, 2006.
- [122] R. K. Janev, W. D. Langer, и E. Douglass Jr, *Elementary processes in hydrogen-helium plasmas: cross sections and reaction rate coefficients*, т. 4. Springer Science & Business Media, 2012.
- [123] С. Е. Куратов, С. Т. Суржиков, и Д. А. Сторожев, «Отчет ВНИИА». 2014.
- [124] D. A. Storozhev и S. E. Kuratov, «Numerical simulation of the kinetics of dissociation and ionization of molecular hydrogen in the penning discharge plasma with the use of the reduced kinetic model», в *Journal of Physics: Conference Series*, 2017, т. 815, с. 012002.

- [125] Ю. П. Райзер и С. Т. Суржиков, «Двумерная структура нормального тлеющего разряда и роль диффузии в формировании катодного и анодного токовых пятен», *Теплофизика Высоких Температур*, т. 26, вып. 3, сс. 428–435, 1988.
- [126] С. Т. Суржиков, «Численное моделирование двухмерной структуры тлеющего разряда с учетом нагрева нейтрального газа», *Теплофизика Высоких Температур*, т. 43, вып. 6, сс. 828–844, 2005.
- [127] А. С. Петрусёв, С. Т. Суржиков, и Д. С. Шенг, «Двумерный тлеющий разряд с учётом колебательного возбуждения молекулярного азота», *Теплофизика Высоких Температур*, т. 44, вып. 6, с. 814, 2006.
- [128] Д. А. Сторожев, С. Е. Куратов, и С. Т. Суржиков, «Численное моделирование 2D структуры тлеющего разряда в молекулярном водороде с учетом кинетики ионизации и диссоциации», *Физико-Химическая Кинетика В Газовой Динамике*, т. 16, вып. 4, сс. 9–9, 2015.
- [129] В. Г. Марков, Д. Е. Прохорович, А. Г. Садилкин, и Н. Н. Щитов, «Определение энергетических характеристик корпускулярной эмиссии из ионных источников газонаполненных нейтронных трубок», *Успехи Прикладной Физики*, т. 1, вып. 1, сс. 23–29, 2013.
- [130] И. Мак-Даниель, Э. Мезон, Е. З. Мейлихова, и А. А. Радциг, *Подвижность и диффузия ионов в газах: Пер. с англ.* Мир, 1976.
- [131] А. А. Самарский и Ю. П. Попов, *Разностные методы решения задач газовой динамики.* УРСС, 2004.
- [132] С. Т. Суржиков, «Двумерная радиационно-газодинамическая модель аэрофизики спускаемых космических аппаратов», *Актуальные Проблемы Механики Жидкости Газа И Плазмы М Наука*, с. 20, 2008.
- [133] J. S. Shang и S. T. Surzhikov, «Magnetoaerodynamic Actuator for Hypersonic Flow Control», *AIAA J.*, т. 43, вып. 8, сс. 1633–1652, 2005.
- [134] J. E. Penner, L. C. Haselman, и L. L. Edwards, «Buoyant plume calculations», в *23rd Aerospace Sciences Meeting*, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1985.
- [135] Л. В. Гурвич, «Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание», 1978.
- [136] R. Bird, V. Stewart, и E. Laitfut, «Transport Phenomena (Khimiya, Moscow, 1974)», *Google Sch.*
- [137] У. Гардинер, «Химия горения», 1988.
- [138] И. П. Гинзбург, «Трение и теплопередача при движении смеси газов», *Л Изд-Во ЛГУ*, 1975.
- [139] Н. А. Анфимов, «Ламинарный пограничный слой в многокомпонентной смеси газов», *Известия АН СССР ОТН Механика И Машиностроение*, вып. 1, 1962.
- [140] R. A. Svehla, «Estimated viscosities and thermal conductivities of gases at high temperatures», National Aeronautics and Space Administration. Lewis Research Center, Cleveland, 1962.
- [141] Л. Лойцянский, *Механика жидкости и газа.* Рипол Классик, 1978.

- [142] К. Флетчер, *Вычислительные методы в динамике жидкостей*. Мир, 1991.
- [143] Д. Андерсон, Т. Дж. и Р. Плетчер, «Вычислительная гидродинамика и теплообмен», 1990.
- [144] S. T. Surzhikov, «Radiative gas dynamics of the Fire-II superorbital space vehicle», *Tech. Phys.*, т. 61, вып. 3, сс. 349–359, 2016.
- [145] R. Seleznev, S. Surzhikov, и J. Shang, «Quasi-one-dimensional analysis of hydrogen-fueled scramjet combustors», в *Proc. 52nd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference AIAA 2016*, 2016, т. 4569.
- [146] В. С. Авдеевский, Э. А. Ашратов, А. В. Иванов, и У. Г. Пирумов, «Газодинамика сверхзвуковых неизобарических струй», *М Машиностроение*, т. 320, 1989.
- [147] С. Т. Суржиков, «Тепловое излучение газов и плазмы. Изд-во МГТУ им. Н», 2004.
- [148] H. F. NELSON, «Influence of particulates on infrared emission from tactical rocket exhausts», *J. Spacecr. Rockets*, т. 21, вып. 5, сс. 425–432, 1984.
- [149] L. A. Dombrovsky, *Radiation heat transfer in disperse systems*. Begell House New York, 1996.
- [150] O. B. Toon, J. B. Pollack, и B. N. Khare, «The optical constants of several atmospheric aerosol species: Ammonium sulfate, aluminum oxide, and sodium chloride», *J. Geophys. Res.*, т. 81, вып. 33, сс. 5733–5748, ноя. 1976.
- [151] D. A. Storozhev, «Numerical simulation of the underexpanded plume spectral radiance using Monte-Carlo method», в *Journal of Physics: Conference Series*, 2018, т. 1009, с. 012039.
- [152] Д. А. Сторожев, С. Т. Суржиков, И. А. Крюков, и С. Е. Куратов, «Расчет имитационными методами Монте-Карло излучения струи ракеты-носителя с использованием автомодельного решения», в *Материалы XI Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ'2016)*, 2016, сс. 193–195.
- [153] H. F. NELSON и E. O. TUCKER, «Boron slurry-fueled jet engine exhaust plume infrared signatures», *J. Spacecr. Rockets*, т. 23, вып. 5, сс. 527–533, 1986.
- [154] H. F. NELSON, «Evaluation of rocket plume signature uncertainties», *J. Spacecr. Rockets*, т. 24, вып. 6, сс. 546–551, 1987.
- [155] M. Wright, R. Rao, G. Candler, J. Hong, T. Schilling, и D. Levin, «Modeling issues in the computation of plume radiation signatures», в *34th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*, American Institute of Aeronautics and Astronautics.
- [156] T. Ozawa, M. B. Garrison, и D. A. Levin, «Accurate Molecular and Soot Infrared Radiation Model for High-Temperature Flows», *J. Thermophys. Heat Transf.*, т. 21, вып. 1, сс. 19–27, 2007.
- [157] С. Т. Суржиков, «Моделирование радиационно-конвективного нагрева модельных камер ПВРД на водородном и углеводородном топливе», *Физико-Химическая Кинетика В Газовой Динамике*, т. 15, вып. 3, сс. 2–2, 2014.