

### **3. Шибков В.М. Изучение влияния различных механизмов передачи энергии на кинетику нагрева молекулярного газа<sup>1</sup>**

#### **Введение**

В последние годы наряду с традиционными экспериментальными методами исследования плазменных объектов все большую роль начинают играть методы математического моделирования, позволяющие не только объяснить наблюдаемые явления, но и предсказать характеристики и оптимальные режимы работы разрабатываемых устройств. Данная задача посвящена математическому моделированию кинетики нагрева молекулярного газа в неравновесной плазме импульсного разряда.

Целью данной работы является ознакомление студентов с методами математического моделирования применительно к такой важной проблеме физики низкотемпературной плазмы, как выявление конкретных механизмов и каналов передачи энергии между различными компонентами и степенями свободы молекулярного газа, приводящих к его быстрому нагреву.

#### **Эксперимент**

В последнее время проводятся интенсивные экспериментальные исследования кинетики нагрева газа при больших значениях приведенного электрического поля  $E/n \geq 100 \text{ Td}$  (смотри [1] и цитируемую в ней литературу). Главное внимание в этих работах уделяется выявлению основных механизмов и конкретных каналов передачи энергии в поступательные степени свободы молекулярного газа, приводящих к его нагреву. При подаче импульсного напряжения на электроды газоразрядной трубки при условии, что напряженность электрического поля превышает пороговое значение, в разрядной камере происходит пробой газа. После пробоя, образовавшаяся плазма начинает интенсивно поглощать подводимую к разряду энергию таким образом, что электроны, получая энергию от поля, передают ее при столкновениях с молекулами нейтральному газу. Энергия, выделяющаяся в газе, распределяется по всем степеням свободы (колебательной, вращательной, поступательной, электронное возбуждение молекул, диссоциация и др.) [2,3].

---

<sup>1</sup> © В.М.Шибков, 2012

© Физический факультет МГУ, 2012

Вычисление распределения энергии электронов по различным каналам возбуждения представляет собой самосогласованную задачу, в которой, с одной стороны, учитывается влияние всех типов потерь энергии на функцию распределения электронов по энергиям, а с другой стороны, с помощью этой функции рассчитываются коэффициенты скорости и потери энергии для тех же каналов возбуждения. Энергия внешнего поля передается слабоионизованному газу таким образом, что сначала эту энергию получают электроны, а от электронов она передается частицам газа. Поэтому электронная и другие компоненты слабоионизованного газа с самого начала находятся в неравновесных условиях и средние энергии частиц, относящихся к разным компонентам, могут различаться. Например, колебательная, вращательная и поступательная температуры в молекулярном газе зависят от способа возбуждения газа и от процессов, приводящих к обмену энергией между различными степенями свободы газа. Особенности баланса энергии электронов в молекулярных газах обусловлены потерями энергии при неупругих процессах, имеющих малые значения пороговых энергий и значительные величины эффективных сечений. Это относится к возбуждению вращательных и колебательных состояний. Благодаря малым значениям пороговых энергий вращения и колебания возбуждаются уже при небольших значениях средней энергии электронов. При этом в отличие от упругих столкновений, характеризующихся малой эффективностью энергообмена  $\delta=2m_e/M$  ( $m_e$  – масса электрона,  $M$  – масса молекулы), при каждом акте возбуждения колебаний или вращений электрон теряет энергию, равную колебательному или вращательному кванту.

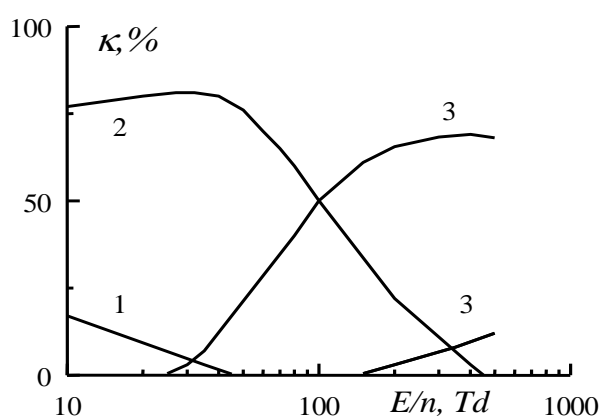


Рис. 1.

На рис.1 на примере плазмы разряда в молекулярном азоте показано распределение полной мощности  $\sigma E^2$  ( $\sigma$  – проводимость плазмы,  $E$  – напряженность электрического поля в плазме), подводимой к электронному газу, передаваемой на упругие потери и возбуждение вращений (1), колебаний (2), электронных состояний (3) и на ионизацию (4).

Из рис. 1 видно, что роль упругих потерь и вращательного возбуждения существенна лишь при малых значениях приведенного электрического поля  $E/n$  ( $n$  – концентрация молекул), т.е. при низких температурах

электронов. Это естественно, поскольку именно эти процессы наиболее эффективно осуществляются нерезонансным образом при малых энергиях электронов. При температурах электронов  $\sim 1$  эВ практически весь разрядный энерговклад локализуется на возбуждение молекулярных колебаний. Роль электронного возбуждения и ионизации существенна при более высоких температурах электронов (и соответственно  $E/n$ ), что естественно в связи с высокими энергетическими порогами этих процессов.

Колебательные кванты молекул при умеренных температурах превышают среднюю энергию поступательного движения тяжелых частиц. Обмен поступательной и колебательной энергией (VT-обмен) затруднен. Это связано с малостью периода колебаний молекулы  $2\pi/\omega$  по сравнению с  $\tau$  – временем взаимодействия сталкивающихся частиц. Поэтому сечение VT-обмена оказывается адиабатически малым  $q \sim \exp(-\omega\tau)$ . Простейшая модель, описывающая возбуждение колебаний двухатомной молекулы при столкновении, разработана Ландау и Теллером и основана на том, что вероятность такого возбуждения адиабатически мала. Согласно адиабатической модели возмущений эта вероятность при усреднении по Максвелловской функции распределения пропорциональна величине

$$P_{v+1,v}(T) = (v+1)P_{10}(T), \quad (1)$$

где  $P_{10}$  – вероятность девозбуждения первого колебательного уровня. Усредненный коэффициент скорости VT-релаксации связан с приведенной в выражении (1) вероятностью соотношением

$$k_{VT}^{v+1,v}(T) = k_0 P_{v+1,v}(T), \quad (2)$$

где  $k_0 \cong 10^{-10} \text{ см}^3 \text{ с}^{-1}$  – коэффициент скорости газокинетических столкновений.

Время колебательной релаксации  $\tau_{VT}$  зависит от температуры газа по закону

$$\tau_{VT} = \tau_{ст} A \exp\left(\text{const} \cdot T^{-\frac{1}{3}}\right), \quad (3)$$

где  $\tau_{ст}$  – пропорционально числу столкновений, необходимых для дезактивации молекулы,  $A$  – медленно меняющаяся функция температуры.

Для VT-релаксации ангармонических осцилляторов существенным оказывается уменьшение энергии перехода с ростом колебательного квантового числа:

$$\hbar\omega_v = \hbar\omega(1 - \chi_e v), \quad (4)$$

где  $\chi_e$  – постоянная ангармонизма. При этом с ростом  $v$  снижается степень

адиабатичности процесса, что приводит к росту вероятности VT–релаксации

$$P_{v+1,v}(T) = (v + 1)P_{10}(T) \exp(\delta_{VT}v), \quad (5)$$

Колебания молекул эффективно возбуждаются электронным ударом (EV–переходы). Этот процесс особенно важен, если температура электронов  $T_e$  значительно превышает  $T$ . В этом случае колебания молекул могут быть сильно возбуждены, другими словами, значительно заселяется большое число колебательных уровней.

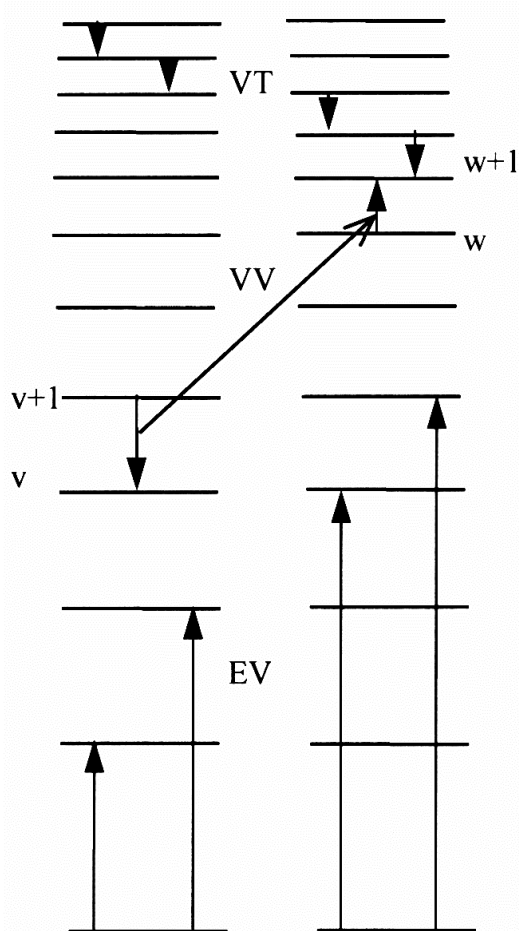
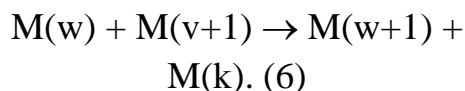


Рис. 2.

При комнатной температуре характерные значения  $\delta_{VT} = 0.2 - 0.5$ .

Важную роль в формировании распределения молекул по колебательным уровням играет обмен колебательными квантами (для краткости, колебательный или VV–обмен), под которым понимается процесс



Этот процесс (смотри рис.2), если учесть ангармоничность колебаний, сопровождается превращением лишь небольшой части колебательной энергии в поступательную (или обратно). Поэтому он идет с большой скоростью даже при низких температурах.

Сравним скорости различных процессов в молекулярном азоте. Коэффициент скорости VV–обмена имеет при комнатных температурах величину  $5 \cdot 10^{-13} \text{ см}^3 \text{ с}^{-1}$ , причем температурная зависимость сравнительно слабая. Коэффициент скорости VT–обмена, напротив, очень сильно растет с температурой. Для нижних колебательных уровней при 2000 К он достигает  $\sim 10^{-15} \text{ см}^3 \text{ с}^{-1}$ , а при температуре 4000 – 5000 К имеет уже такой же порядок, как коэффициент скорости VV–обмена. Коэффициент скорости возбуждения колебательных уровней электронами (EV–процесс) при  $T_e \sim 1 \text{ эВ}$

имеет величину около  $3 \cdot 10^{-9} \text{ см}^3 \text{ с}^{-1}$ . Нетрудно оценить, используя приведенные коэффициенты, что при  $n_e/n \leq 10^{-5}$  и  $T \leq 2000 - 3000 \text{ К}$  VV-обмен протекает быстрее других процессов.

В атомарной плазме обмен энергией при столкновениях электронов с тяжелыми частицами затруднен и, наоборот, весьма эффективен при межэлектронных столкновениях. В результате электронный газ образует квазизамкнутую систему с равновесным распределением по энергиям, температура которой определяется балансом энергии электронного газа. Аналогичная ситуация возникает при рассмотрении распределения по колебательным состояниям (VT-обмен затруднен, а VV-обмен весьма эффективен). Возникает распределение по колебательным состояниям, известное

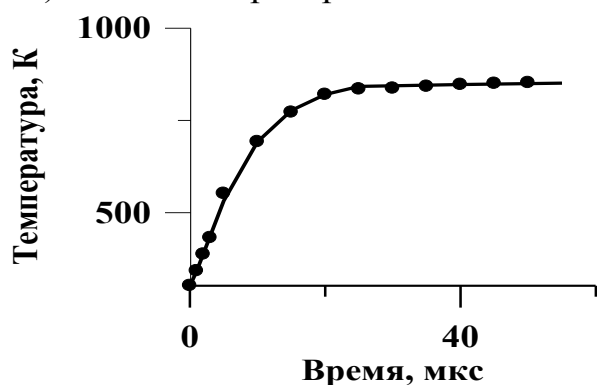


Рис.3.

как квазиравновесное, или распределение Тринора. Если молекулу можно представить как гармонический осциллятор, то обмен квантами идет без дефекта энергии, а распределение Тринора совпадает с больцмановским при некоторой колебательной температуре.

Экспериментальное изучение нагрева молекулярного газа при больших значениях приведенного электрического поля  $E/n \geq 100 \text{ Тд}$  показало (смотри рис.3), что при импульсном включении поля происходит быстрый нагрев газа со скоростью десятки градусов на микросекунду. Временная эволюция температуры газа долгое время не могла быть объяснена с помощью известных в то время механизмов и соответственно этому наблюдаемый в экспериментах нагрев газа был назван аномально быстрым.

Известны различные механизмы, которые могли бы приводить к нагреву молекулярного газа [1]. Так при упругом взаимодействии электронов с тяжелыми частицами часть энергии электронов передается в поступательные степени свободы молекул, приводя к их нагреву.

При умеренных значениях приведенного электрического поля  $E/n \approx 30 - 70 \text{ Тд}$  основная часть (до  $\sim 80\%$ ) энергии электронов тратится на колебательное возбуждение молекул (см. рис.1). При этом за счет колебательно-поступательной релаксации часть энергии может передаваться в нагрев газа. Однако для азота из-за большой величины колебательного кванта вероятность VT-релаксации при низких температурах газа мала и, как пока-

зывает эксперимент [1], время VT–релаксации на нижних колебательных уровнях основного состояния азота составляет сотни миллисекунд, тогда как нагрев газа происходит за десятки микросекунд.

Важную роль в формировании распределения молекул по колебательным уровням играет обмен колебательными квантами [2,3]. Этот процесс, если учесть ангармонизм колебаний, сопровождается превращением лишь небольшой части колебательной энергии в поступательную. Поэтому он идет с большой скоростью даже при низких температурах и в принципе мог бы обеспечить достаточно большую скорость нагрева газа. Однако, как показывает эксперимент [1], быстрый нагрев газа, если бы за нагрев газа был ответственен VV–обмен, должен был бы наблюдаться и в начальной стадии деионизации плазмы после выключения поля. В стадии же деионизации плазмы наблюдается сравнительно медленный нагрев газа со скоростью  $\sim 0,1$  К/мкс. Данная скорость нагрева вполне обеспечивается, как показали расчеты [1], за счет VV– и VT– процессов.

С ростом величины  $E/n$  доля энергии, передаваемая на колебательное возбуждение молекул, уменьшается, тогда как растет доля энергии, идущая на возбуждение электронных состояний молекул (см. рис.1). При этом, если колебательно–поступательная релаксация в воздухе протекает достаточно медленно, то известно [1], что процессы тушения электронно–возбужденных молекул, протекающие по различным каналам с передачей части энергии в поступательные степени свободы молекул, идут достаточно быстро и могли бы в принципе обеспечить наблюдаемый быстрый нагрев газа.

Для выяснения вклада в кинетику нагрева воздуха различных механизмов, приводящих к передаче энергии в поступательную степень свободы молекулярного газа необходимо провести сравнение экспериментально полученных результатов с данными математического моделирования временной эволюции температуры газа.

### **Нестационарная кинетическая модель**

Известно [2,3], что в разрядах в воздухе,  $N_2$ , CO,  $CO_2$  и других молекулярных газах колебательно возбужденные молекулы образуют резервуар энергии. Параметры разряда сильно зависят от способа, которым эта энергия перераспределяется между различными степенями свободы молекулярного газа. При этом существует сильная связь между колебательно воз-

бужденными молекулами азота в основном электронном состоянии  $X^1\Sigma_g^+$  и функцией распределения электронов по энергиям. Эта связь главным образом вызывается ударами второго рода электронов с колебательно возбужденными молекулами азота, что приводит к увеличению доли быстрых электронов в плазме разряда и, соответственно, к увеличению средней энергии электронов, что, в свою очередь, ведет к резкому возрастанию скоростей электронного возбуждения и ионизации и увеличению концентрации электронно–возбужденных и активных частиц в плазме. Реакции, протекающие в неравновесной плазме с участием этих частиц, приводят к росту температуры газа, которая оказывает сильное влияние на величину констант скоростей реакций с участием тяжелых частиц.

Для понимания неравновесных плазменных систем необходимо знать полную кинетику процессов, протекающих в плазме. С этой целью в данной задаче рассматривается нестационарная кинетическая модель [1], включающая в себя нестационарное уравнение Больцмана (7) для функции распределения электронов по энергиям  $f(\varepsilon, t)$ , систему нестационарных уравнений баланса для заселенностей колебательных уровней  $n_v$  основного состояния  $X^1\Sigma_g^+$  молекулы азота (8), для заселенностей  $n_x$  электронно–возбужденных состояний  $A^3\Sigma_u^+$ ,  $B^3\Pi_g$ ,  $C^3\Pi_u$ ,  $a'^1\Sigma_u^-$ ,  $a^1\Pi_g$ ,  $a^1\Delta_g$ ,  $b^1\Sigma_g^+$  молекул азота и кислорода (9), для концентраций (10) активных  $n_y$  (N, O, O<sub>3</sub>, NO, NO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O) и (11) заряженных  $n_i$  ( $n_e$ , O<sup>-</sup>, O<sub>2</sub><sup>-</sup>, O<sub>3</sub><sup>-</sup>, O<sub>4</sub><sup>-</sup>, NO<sup>-</sup>, NO<sub>2</sub><sup>-</sup>, N<sub>2</sub>O<sup>-</sup>, n<sup>+</sup>) частиц, образующихся в плазме, и нестационарное уравнение теплопроводности для температуры газа (12)

$$\frac{\partial f(\varepsilon, t)}{\partial t} = -\frac{\partial J_f}{\partial \varepsilon} - \frac{\partial J_l}{\partial \varepsilon} + In + Sup + Rot, \quad (7)$$

$$\frac{\partial n_v}{\partial t} = \left(\frac{\partial n_v}{\partial t}\right)_{ev} + \left(\frac{\partial n_v}{\partial t}\right)_{vw} + \left(\frac{\partial n_v}{\partial t}\right)_{vt} + \left(\frac{\partial n_v}{\partial t}\right)_{ed} + \left(\frac{\partial n_v}{\partial t}\right)_{vd} + \left(\frac{\partial n_v}{\partial t}\right)_{xv} \quad (8)$$

$$\frac{\partial n_x}{\partial t} = \left(\frac{\partial n_x}{\partial t}\right)_{ex} + \left(\frac{\partial n_x}{\partial t}\right)_{xx} + \left(\frac{\partial n_x}{\partial t}\right)_{xy} + \left(\frac{\partial n_x}{\partial t}\right)_{xv} + \left(\frac{\partial n_x}{\partial t}\right)_{xr} \quad (9)$$

$$\frac{\partial n_y}{\partial t} = \left(\frac{\partial n_y}{\partial t}\right)_{yi} + \left(\frac{\partial n_y}{\partial t}\right)_{yx} + \left(\frac{\partial n_y}{\partial t}\right)_{yy} \quad (10)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = \left(\frac{\partial n_i}{\partial t}\right)_{ii} + \left(\frac{\partial n_i}{\partial t}\right)_{ix} + \left(\frac{\partial n_i}{\partial t}\right)_{iy} + \left(\frac{\partial n_i}{\partial t}\right)_{iv} \quad (11)$$

$$cn_0 \frac{\partial T_g}{\partial t} = \left(\frac{\partial T_g}{\partial t}\right)_{el} + \left(\frac{\partial T_g}{\partial t}\right)_{vt} + \left(\frac{\partial T_g}{\partial t}\right)_{vw} + \left(\frac{\partial T_g}{\partial t}\right)_{xt} - Q_q \quad (12)$$

Данная кинетическая модель, учитывающая всевозможные процессы

передачи энергии между различными степенями свободы молекулярного газа, позволяет рассчитывать временную эволюцию электронной, колебательной и поступательной энергий как в активной фазе при наличии сильных полей, так и в стадии деионизации плазмы разряда в сухом воздухе.

В рассматриваемой кинетической модели для расчета функции распределения электронов по энергиям используется нестационарное однородное уравнение Больцмана, полученное из двухчленной аппроксимации и записываемое в виде [1]:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{n} \frac{\partial f(\varepsilon, t)}{\partial t} = & \frac{1}{3} \left( \frac{eE_{ef}}{n} \right)^2 \frac{2}{m} \frac{1}{\varepsilon^{1/2}} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left( \frac{\varepsilon^{3/2}}{\tilde{n}_c} \frac{\partial f(\varepsilon, t)}{\partial \varepsilon} \right) + \\
& + 2 \frac{m}{M} \frac{1}{\varepsilon^{1/2}} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left( \tilde{\nu}_c \varepsilon^{3/2} f(\varepsilon, t) + \frac{kT_g}{e} \frac{\partial f(\varepsilon, t)}{\partial \varepsilon} \right) + \\
& + 4 B_0 \frac{1}{\varepsilon^{1/2}} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left( \tilde{\nu}_{re} \varepsilon^{1/2} f(\varepsilon, t) \right) - \\
& - \sum_v \frac{n_v}{n} \sum_1 [\tilde{\nu}_{v1} f(\varepsilon, t) - \left( \frac{\varepsilon + \varepsilon_{v1}}{\varepsilon} \right)^{1/2} \tilde{\nu}_{v1}(\varepsilon + \varepsilon_{v1}) f(\varepsilon + \varepsilon_{v1}, t)] - \\
& - \sum_v \frac{n_v}{n} \sum_w [\tilde{\nu}_{vw} f(\varepsilon, t) - \left( \frac{\varepsilon + \varepsilon_{vw}}{\varepsilon} \right)^{1/2} \tilde{\nu}_{vw}(\varepsilon + \varepsilon_{vw}) f(\varepsilon + \varepsilon_{vw}, t)] \\
& - \sum_v \frac{n_v}{n} \sum_w [\tilde{\nu}_{wv} f(\varepsilon, t) - \left( \frac{\varepsilon - \varepsilon_{wv}}{\varepsilon} \right)^{1/2} \tilde{\nu}_{wv}(\varepsilon - \varepsilon_{wv}) f(\varepsilon - \varepsilon_{wv}, t)],
\end{aligned} \tag{13}$$

где  $f(\varepsilon)$  – функция распределения электронов по энергиям нормированная

так, что для любого момента времени  $\int_0^{\infty} f(\varepsilon, t) \varepsilon^{1/2} d\varepsilon = 1$ ;  $\varepsilon$  – энергия налетающих электронов;

$\tilde{\nu}_c = (2/m)^{1/2} \varepsilon^{1/2} \sigma_c(\varepsilon)$ ,  $\tilde{\nu}_{re} = (2/m)^{1/2} \varepsilon^{1/2} \sigma_{re}(\varepsilon)$ ,

$\tilde{\nu}_{v1} = (2/m)^{1/2} \varepsilon^{1/2} \sigma_{v1}(\varepsilon)$ ,  $\tilde{\nu}_{vw} = (2/m)^{1/2} \varepsilon^{1/2} \sigma_{vw}(\varepsilon)$  – нормированные частоты столкновений для различных рассматриваемых процессов;  $e$  и  $m$  – заряд и масса

электрона;  $T_g$  – температура газа;  $\sigma_c$  – транспортное сечение рассеяния электронов на молекулах;  $\sigma_{re}$  – сечение возбуждения вращательных уровней электронным ударом;  $\sigma_{v1}$  – сечение неупругих столкновений электронов с молекулами при возбуждении их с  $v$ -го на 1-ое состояние;  $\sigma_{vw}$  – сечение

возбуждения колебательного уровня  $w$  при столкновении электрона с молекулой, находящейся на уровне  $v$  основного состояния;  $\varepsilon_{v1}$ ,  $\varepsilon_{vw}$  – пороговые энергии для рассматриваемых переходов;  $n$  – полная концентрация молекул;  $n_v$  – концентрация молекул на  $v$ -ом колебательном уровне

основного состояния  $X^1\Sigma_g^+$  молекулы азота,  $x_v = n_v/n$  – относительное



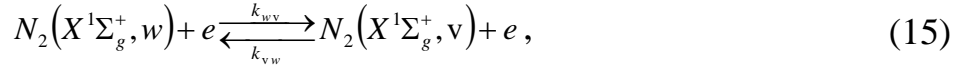
число молекул в  $v$ -ом состоянии, удовлетворяющее условию  $\sum_v x_v = 1$ .

Уравнение (13) означает, что изменение в общем потоке электронов вдоль энергетической оси (три первых члена в правой части, связанных с действием электрического поля, упругими столкновениями и возбуждением вращательных степеней свободы) обусловлены приходом и уходом электронов за счет неупругих столкновений первого и второго рода. Уравнение (13) заменяется разностным уравнением, решение которого проводится стандартным методом прогонки.

В явной форме систему уравнений баланса (8) для заселенностей колебательных уровней  $n_v$  состояния  $N_2(X^1\Sigma_g^+)$  можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \frac{dn_v}{dt} = & n_e \sum_{\substack{w=0 \\ w \neq v}} n_w k_{wv}^e - n_e n_v \sum_{\substack{w=0 \\ w \neq v}} k_{vw}^e + n_{v-1} n P_{v-1,v} + n_{v+1} n P_{v+1,v} - \\ & - n_v n (P_{v,v-1} + P_{v,v+1}) + n_{v-1} \sum_{w=0}^{n-1} n_{w+1} Q_{v-1,v}^{w+1,w} + n_{v+1} \sum_{w=0}^n n_w Q_{v+1,v}^{w,w+1} - \\ & - n_v \left( \sum_{w=0}^{n-1} n_{w+1} Q_{v,v+1}^{w+1,w} + \sum_{w=0}^n n_w Q_{v,v-1}^{w,w+1} \right) + R(v) \end{aligned} \quad (14)$$

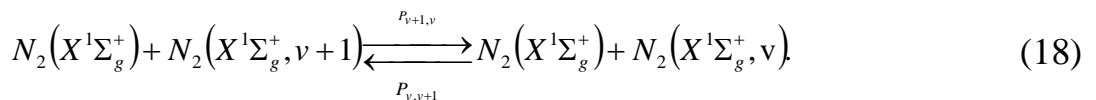
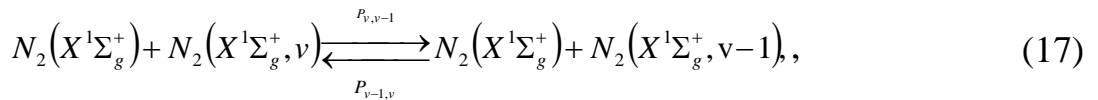
где  $k_{wv}^e = \int_{\varepsilon_{wv}}^{\infty} \sigma_{wv}(\varepsilon) \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m}} f(\varepsilon) d\varepsilon$  – константа скорости заселения колебательного уровня  $v$  электронным ударом в результате процесса



В расчетах учитывается возбуждение и девозбуждение первых десяти колебательных уровней основного состояния  $X^1\Sigma_g^+$  молекулы азота электронным ударом в результате реакции (15), где  $0 \leq v \leq 10$ ,  $0 \leq w \leq 10$ . Сечения прямых процессов берутся из [3], а сечения обратных процессов вычисляются с использованием принципа детального равновесия.

$$\sigma_{wv}(\varepsilon) = \frac{\varepsilon + \varepsilon_{wv}}{\varepsilon} \sigma_{vw}(\varepsilon + \varepsilon_{wv}), \quad (16)$$

$P_{v,v-1}$  – константа скорости VT-релаксации в результате процессов:



$Q_{v,v-1}^{w,w+1}$  – константа скорости VV-обмена в результате процессов:

$$N_2(X^1\Sigma_g^+, v) + N_2(X^1\Sigma_g^+, w) \xrightleftharpoons[Q_{v-1,v}^{w+1,w}]{Q_{v,v-1}^{w,w+1}} N_2(X^1\Sigma_g^+, v-1) + N_2(X^1\Sigma_g^+, w+1), \quad (19)$$

$$N_2(X^1\Sigma_g^+, v+1) + N_2(X^1\Sigma_g^+, w) \xrightleftharpoons[Q_{v,v+1}^{w+1,w}]{Q_{v+1,v}^{w,w+1}} N_2(X^1\Sigma_g^+, v) + N_2(X^1\Sigma_g^+, w+1). \quad (20)$$

Коэффициенты скоростей VT– и VV–процессов обмена энергией вычисляются из SSH–теории [1], модифицированной для VT– и VV–процессов. Коэффициенты скоростей для обратных процессов находятся из принципа детального равновесия. Для вычисления энергии колебательных уровней используется приближение ангармонического осциллятора

$$E_v = \hbar\omega(v + 1/2) - x_e \hbar\omega(v + 1/2)^2 \quad (21)$$

с  $\hbar\omega = 2358,57c^{-1}$  и  $x_e \hbar\omega = 14,32c^{-1}$  [3]. Отсюда уровень  $v = 46$  соответствует энергии диссоциации азота и значит система (8) состоит из 46 уравнений для  $0 \leq v \leq 45$ .

Уравнения, определяющие концентрацию возбужденных, активных и заряженных частиц, образующихся в процессе существования разряда, включают в себя процессы возбуждения электронных состояний, ионизацию и диссоциацию тяжелых частиц электронным ударом, ассоциативную ионизацию, прилипание и отлипание электронов с участием электроположительных компонентов воздуха, электрон–ионную и ион–ионную рекомбинацию, ионную конверсию и химические преобразования частиц в основном и возбужденных состояниях:

$$\frac{dn_k}{dt} = \sum_{m,q} (n_m w_{mk}^q - n_k w_{km}^q) + F_k - n_k G_k \quad (22)$$

где  $w_{mk}^q$  – вероятность перехода из состояния  $k$  в состояние  $m$  под воздействием  $q$ -го элементарного процесса;  $F_k$  – источник образования частиц в  $k$ -ом состоянии за счет процессов, в которых не участвует рассматриваемая частица либо ее ион, то есть  $F_k$  не зависит от  $n_k$ . Например, диссоциативная рекомбинация с образованием возбужденного атома в  $k$ -ом состоянии. Тогда  $F_k = n_2^+ n_e k_d^f$  ( $k_d^f$  – константа диссоциативной рекомбинации с образованием возбужденного атома в  $k$ -ом состоянии,  $n_2^+$  – концентрация молекулярных ионов). Группа процессов  $G_k$  описывает гибель возбужденных атомов в результате процессов, в которых не образуются атомы рассматриваемого элемента ни в основном, ни в возбужденном состояниях. Ассоциативная ионизация может быть примером процесса типа  $G_k$ . В этом случае  $G_k = n_a k_a^i$  ( $k_a^i$  – константа ассоциативной ионизации атома в  $k$ -ом

состоянии. В случае диффузии  $G_k = (1/n_k) \text{div} J_k$ , где  $J_k$  – диффузионный поток частиц в  $k$ -ом состоянии, обусловленный их пространственным перемещением. Необходимые для расчета концентраций частиц константы скоростей реакций и их температурные зависимости приведены в [1] и в цитируемой в этой работе литературе.

К нагреву газа могут приводить следующие процессы: передача энергии в поступательные степени свободы при упругих ударах электронов с молекулами; вращательно–поступательная и колебательно–поступательная релаксация; колебательно–колебательный обмен и тушение электронно–возбужденных состояний. Тогда уравнение (12) можно переписать в виде:

$$\begin{aligned}
 cn \frac{dT_s}{dt} = & 2 \frac{m}{M} n_e \frac{3}{2} k(T_e - T_g) \overline{v_e(\varepsilon)} + E_1 \sum_{v=1}^n (1 - 2\chi_e v) (n_v P_{v,v-1} - n_{v-1} P_{v-1,v}) + \\
 & + 2E_1 \chi_e \sum_{v=1}^n n_v \left( \sum_{w=1}^n (w-v) n_{w-1} Q_{v,v-1}^{w-1,w} \right) + \eta_1 \varepsilon_A k_{AA}^{XB} n_A^2 + \eta_2 \varepsilon_A k_{AA}^{XC} n_A^2 + \\
 & + \eta_3 \varepsilon_A k_{AX}^{XB} n_A n_X - Q_q.
 \end{aligned} \tag{23}$$

Первое слагаемое в правой части уравнения (23) определяет энергию, передаваемую электронами тяжелым частицам при упругих столкновениях с молекулами газа (где  $M$  – масса молекулы;  $n_e$  и  $T_e$  – концентрация и температура электронов;  $\overline{v_e(\varepsilon)}$  – частота упругих столкновений, усредненная по функции распределения электронов по энергиям).

С ростом величины приведенного электрического поля до  $E/n \leq 100$  Td основные потери энергии электронов обусловлены колебательным возбуждением молекул. Так как значительное количество энергии, идущей на колебательное возбуждение молекул, может быть передано обратно электронам при сверхупругих столкновениях, то необходимо самосогласованное изучение функции распределения электронов по энергиям и функции распределения молекул по колебательным уровням основного состояния. При этом у функции распределения электронов по энергиям возрастает доля быстрых электронов, что приводит к значительному увеличению констант скоростей возбуждения различных уровней молекул. Часть энергии, запасенной в колебательном резервуаре, может быть передана в нагрев газа либо (второй член в правой части уравнения (23)) за счет VT – обмена между молекулами азота, при этом часть колебательной энергии

$$\Delta E_{VT} = E_V - E_{V-1} \tag{24}$$

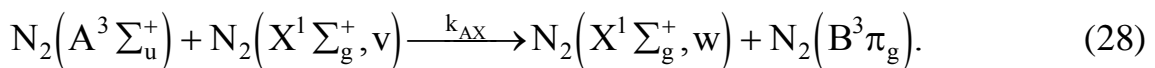
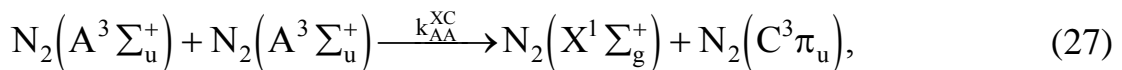
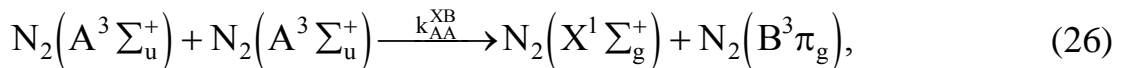
передается в поступательные степени свободы молекул, либо (третий член в правой части уравнения (23)) за счет VV–обмена, при этом  $v + w = v' + w'$

и малая часть энергии

$$\Delta E_{VV} = E_V + E_W - E_{V'} - E_{W'} \quad (25)$$

передается в тепло. Так как время VV–обмена (для нижних колебательных уровней) много меньше, чем время VT–релаксации, то вклад в нагрев газа VV–обмена может быть значительно больше вклада за счет процесса VT–релаксации, несмотря на то, что только малая часть энергии передается при этом в тепло. Атомы азота вероятно столь же и даже более эффективно могут тушить колебательно возбужденные молекулы азота [4]. Поэтому, если концентрация атомов азота в разряде велика, необходимо учитывать этот процесс при изучении кинетики нагрева молекулярного газа. Однако, как показано в [1], наработка атомов азота в разряде происходит за времена порядка или больше нескольких десятков микросекунд. Тогда как на начальной стадии разряда, когда экспериментально наблюдается быстрый нагрев газа, концентрация атомов азота пренебрежимо мала [ $n_N \approx (10^{-2} \div 10^{-1})n_N^{st}$ ] и влиянием этого процесса можно пренебречь.

Если значение  $E/n > 100 \text{ Td}$ , то значительная часть (~50 % и более) энергии, полученной электронами от поля, идет на возбуждение электронных состояний молекул и ионизацию (см. рис.1). В этом случае концентрация электронно возбужденных состояний азота может быть велика и часть их энергии при тушении (четвертый – шестой члены в правой части уравнения (23)) передается в тепло:



При расчете использовались следующие значения коэффициентов скоростей реакций с участием метастабильных молекул  $A^3 \Sigma_u^+$   $k_{AA}^{XC} = 1.1 \cdot 10^{-9} \text{ см}^3 \text{ с}^{-1}$ ,  $k_{AA}^{XB} = 2.6 \cdot 10^{-10} \text{ см}^3 \text{ с}^{-1}$ ,  $k_{AX} = 3 \cdot 10^{-10} \text{ см}^3 \text{ с}^{-1}$  [1]. При этом энергия участвующих в рассматриваемых реакциях частиц делится между поступательными и колебательными степенями свободы молекулы азота. Приблизительно половина остающейся энергии идет в колебательное возбуждение, а половина – в нагрев. Отсюда доля энергии, идущая в нагрев в результате процесса  $A + A \rightarrow X + B$ ,  $\eta_1 \approx 0.5$ , для процесса  $A + A \rightarrow X + C$  –  $\eta_2 \approx 0.13$ , а для процесса  $A + X \rightarrow X + B$ ,  $C$  –  $\eta_3 \approx 0.16$ .

Потери энергии в окружающую среду  $Q_q$  определяются теплопро-

водностью за счет поступательно–вращательных степеней свободы и тепловым излучением в приближении объемного излучателя.

### Упражнения

1. Рассчитать кинетику нагрева воздуха при учете только упругого взаимодействия электронов с молекулами газа для условий: начальная температура газа  $T_{g0} = 300 \text{ K}$ , давление воздуха  $p = 35 \text{ Тор}$ , приведенное электрическое поле  $E/n = 200 \text{ Td}$ , концентрация электронов  $n_e = 2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ . Сравнить рассчитанные временные зависимости температуры  $T_g$  и скорости нагрева газа  $dT_g/dt$  с экспериментально измеренными величинами.

2. Рассчитать кинетику нагрева воздуха только за счет VT–релаксации колебательно возбужденных молекул азота в основном состоянии  $X^1\Sigma_g^+$  для условий:  $T_{g0} = 300 \text{ K}$ ,  $p = 35 \text{ Тор}$ ,  $E/n = 200 \text{ Td}$ ,  $n_e = 2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ . Сравнить рассчитанные зависимости  $T_g(t)$  и  $dT_g/dt$  с экспериментально измеренными зависимостями.

3. Рассчитать кинетику нагрева воздуха только за счет VT–релаксации и VV–обмена колебательно возбужденных молекул азота в основном состоянии  $X^1\Sigma_g^+$  для условий:  $T_{g0} = 300 \text{ K}$ ,  $p = 35 \text{ Тор}$ ,  $E/n = 200 \text{ Td}$ ,  $n_e = 2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ . Сравнить рассчитанные временные зависимости температуры и скорости нагрева газа с экспериментально измеренными величинами.

4. Рассчитать кинетику нагрева воздуха при учете упругого взаимодействия электронов с молекулами газа, VT–релаксации и VV–обмена колебательно возбужденных молекул азота в основном состоянии  $X^1\Sigma_g^+$  и тушения электронно–возбужденных молекул азота в состоянии  $A^3\Sigma_u^+$  колебательно возбужденными молекулами азота в состоянии  $X^1\Sigma_g^+$  для условий:  $T_{g0} = 300 \text{ K}$ ,  $p = 35 \text{ Тор}$ ,  $E/n = 200 \text{ Td}$ ,  $n_e = 2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ . Сравнить рассчитанные зависимости температуры  $T_g(t)$  и скорости нагрева газа  $dT_g/dt$  с экспериментально измеренными зависимостями.

5. Рассчитать кинетику нагрева при учете всех процессов, которые могут приводить к нагреву воздуха (то же, что в пункте 4 плюс самотушение электронно–возбужденных молекул азота в состоянии  $A^3\Sigma_u^+$ ), для условий:  $T_{g0} = 300 \text{ K}$ ,  $p = 35 \text{ Тор}$ ,  $E/n = 200 \text{ Td}$ ,  $n_e = 2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ . Сравнить рас-

считанные временные зависимости температуры и скорости нагрева газа с экспериментально измеренными величинами.

6. Рассчитать зависимость максимальной скорости нагрева воздуха, достигаемой в течение импульса, от величины приведенного электрического поля  $E/n$  при учете всех процессов, которые могут приводить к нагреву газа для условий  $T_{g0} = 300\text{K}$ ,  $p=35\text{ Тор}$ ,  $n_e = 2 \cdot 10^{12}\text{ см}^{-3}$ . Сравнить рассчитанную зависимость скорости нагрева газа с экспериментально измеренной зависимостью.

7. Рассчитать зависимость максимальной скорости нагрева воздуха, достигаемой в течение импульса, от величины концентрации электронов при учете всех процессов, которые могут приводить к нагреву газа для условий  $E/n=100\text{ Td}$ ,  $T_{g0} = 300\text{K}$ ,  $p=35\text{ Тор}$ ,  $n_e = 2 \cdot 10^{12}\text{ см}^{-3}$ . Сравнить рассчитанную зависимость скорости нагрева газа с экспериментально измеренной зависимостью.

### Литература

1. Зарин С.А., Кузовников А.А., Шибков В.М. Свободно локализованный СВЧ-разряд в воздухе. –М.: Нефть и газ, 1996, 204с.
2. Русанов В.Д., Фридман А.А. Физика химически активной плазмы. –М.: Наука, 1984, 415с.
3. Девятов А.М., Шибков В.М. Элементарные процессы и кинетика низкотемпературной плазмы. Учебное пособие. –М.: МГУ, 1992, 96с.
4. Неравновесная колебательная кинетика. Под редакцией Капителли М. –М.: Мир, 1989, 391с.

### **Инструкция к выполнению задачи: "Изучение влияния различных механизмов передачи энергии на кинетику нагрева молекулярного газа"**

1. Включить компьютер. Запустить программу, щелкнув мышкой на ярлыке, расположенном на рабочем столе.
2. Откроется программа.
3. В программе имеются различные окна.

Окно [Параметры].

В нем имеются окна [Параметры задачи] и [Спец. настройки].

Окно [Параметры задачи] служит для ввода таких параметров, как

время счета, приведенное поле, давление газа, концентрация электронов и эффективное время экранировки поля.

Окно [**Спец.настройки**] служит для ввода точности расчета, начального шага, длины диаграммы и усреднения.

Окно [**Модель**].

В нем заложено пять моделей: упругий нагрев, тушение метастабилей, тушение метастабилей ( $v=8$ ), VT–релаксация и VV–обмен. Для выбора необходимой для расчета модели необходимо поставить перед ней галочку.

Окно [**Настройка масштаба**].

В данном окне можно настроить параметры диаграммы, отражающей результаты счета.

5. В программе имеются также различные управляющие кнопки.

Кнопка [**Старт/стоп**] – запускает/останавливает программу счета.

Кнопка [**Сохранить графики**] – для сохранения результатов счета в отдельном файле.

Кнопка [**Загрузить эксперимент**] – для загрузки в программу экспериментальных данных.

Кнопка [**Сброс**] – для очистки диаграммы от результатов предыдущего счета.

Кнопка [**Эксперимент**] – для показа или отмены показа экспериментальных данных.

Кнопка [**Производные**] – для изменения вида графиков (величина или ее производная).

Кнопка [**Колебательные уровни**] – для показа или отмены показа на диаграмме временных зависимостей концентраций колебательных уровней.

6. Получить у преподавателя задание.

7. Ввести данные для расчета.

8. Запустить программу и выполнить расчет.

9. Сохранить полученные данные.

10. Построить с помощью любого графического редактора все графики.

11. Выйти из программы.