



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 91 за 2007 г.

ISSN 2071-2898 (Print)  
ISSN 2071-2901 (Online)

**В.В. Русанов, В.П. Силаков,  
А.В. Чеботарев**

Физико-математическая  
модель неравновесного  
микроволнового разряда в  
азотной среде, описывающая  
электродинамические,  
кинетические и  
газодинамические процессы.

Статья доступна по лицензии  
[Creative Commons Attribution 4.0 International](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)



**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Русанов В.В., Силаков В.П., Чеботарев А.В. Физико-математическая модель неравновесного микроволнового разряда в азотной среде, описывающая электродинамические, кинетические и газодинамические процессы. // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2007. № 91. 12 с.

<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2007-91>

## **Физико-математическая модель неравновесного микроволнового разряда в азотной среде, описывающая электродинамические, кинетические и газодинамические процессы.**

Русанов В.В., Силаков В.П., Чеботарев А.В.

### Введение

Воздействие микроволнового электрического разряда на высокоскоростные потоки молекулярных газов имеет широкий прикладной интерес. В зависимости от прикладного характера задачи большой интерес представляет возможность выбора разрядных режимов для селективного возбуждения различных степеней свободы частиц газа. В быстро проточных лазерных системах вложение энергии поля в электронные и колебательные степени свободы газа является задачей требующей точной оптимизации режимов накачки рабочей среды и минимизации дестабилизирующих факторов, таких как, акустический и газодинамический отклик среды (см. [1,2]). Вложение энергии микроволнового электрического поля в нагрев движущегося газа представляет интерес для задач связанных с изменениями характеристик и управлением потоками газов. В таких разрядах особенно эффективно осуществляется нагрев молекулярных газов (например, воздушной смеси) в режимах в которых основная доля энергии поля расходуется на возбуждение колебаний молекул и в меньшей степени на прямой нагрев газа, его диссоциацию, ионизацию и излучение (см., например, [3]). В этом случае релаксация колебаний молекул в поступательные степени свободы частиц является доминирующим фактором быстрого нагрева газа и изменения характеристик его движения.

Ниже на примере молекулярного азота, как основной компоненты воздушной смеси, рассматривается воздействие микроволнового разряда на динамику разлета и газоразрядные характеристики среды. Описание кинетиче-

ских явлений в разряде производится в рамках разветвленной кинетической схемы неравновесных плазмохимических процессов [3].

### Постановка задачи

Рассмотрим в плоской одномерной геометрии эволюцию состояния молекулярного азота при воздействии на него плоской электромагнитной волны. В начальный момент времени  $t=0$  на покоящийся газ вдоль положительной оси  $x$  падает электромагнитная волна с напряженностью поля  $E_0$  и длиной волны  $\lambda_0$ . Газ занимает область  $x>0$  и отделен от полупространства  $x<0$  радиопрозрачной перегородкой в точке  $x=0$ . В области  $0 < x < x_1$  находится слабый внешний источник предионизации  $Q_e(x)$ , который в отсутствие электрического поля формирует в заданной области пространства начальное стационарное распределение свободных электронов с концентрацией  $n_e^*(x)$ , играющих роль «начальных затравочных» электронов. При  $t>0$  в области предионизированного газа начинает развиваться электрический разряд, в котором энергия электрического поля полностью либо частично поглощается электронной компонентой плазмы. В столкновениях с молекулами электроны передают свою энергию во внутренние степени свободы частиц газа. При этом происходит возбуждение вращательных, колебательных и электронных состояний молекул. Релаксация энергии, заключенной во внутренних степенях свободы молекул определяет темп нагрева газа и динамику его разлета вдоль оси  $x$ .

Самосогласованное решение задачи описывается замкнутой системой уравнений электродинамики, газодинамики и плазмохимической кинетики.

При распространении электромагнитных волн в ионизированном газе свободные электроны взаимодействуют с осциллирующим полем:

$$E = E(x, t)e^{i\omega t}$$

Взаимодействие определяет динамику электронной компоненты и изменяет ее рассеивающие и поглощающие свойства. Если поле поперечное, то уравнение для комплексной амплитуды поля имеет вид:

$$\frac{\partial^2 E}{\partial x^2} + \frac{\omega_0^2}{c^2} \hat{\varepsilon} E = 0,$$

где  $\omega_0$  - частота электрического поля,  $c$  - скорость света в вакууме,  $\hat{\varepsilon} = \varepsilon' - i4\pi\sigma/\omega$  - комплексная диэлектрическая проницаемость плазмы,  $\varepsilon' = 1 - \hat{n}_e$  и  $\sigma = \nu_p \hat{n}_e / 4\pi$  - диэлектрическая проницаемость и проводимость среды,  $\nu_p$  - эффективная частота релаксации импульса электронов,  $\hat{n}_e = n_e / n_c$ ,  $n_e$  - концентрация электронов,  $n_c = m(\omega^2 + \nu_p^2) / 4\pi e^2$  - критическая концентрация электронов ( $e$  и  $m$  - заряд и масса электрона).

Движение газа, вызванное релаксацией внутренней энергии частиц в нагрев, описывается системой уравнений газодинамики в которой уравнение непрерывности записано для каждой компоненты плазмы в отдельности:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_e}{\partial t} + \frac{\partial(n_e v)}{\partial x} &= Q_e + \Psi_e + \frac{\partial}{\partial x} D_e \frac{\partial n_e}{\partial x}, & \frac{\partial n_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial(n_\alpha v)}{\partial x} &= \Psi_\alpha, \\ \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(p + \rho v^2) &= 0, & \frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}[(e + p)v] &= Q. \\ \rho &= \sum_\alpha m_\alpha n_\alpha, & p &= \sum_\alpha k \cdot n_\alpha \cdot T, & e &= \sum_\alpha \frac{n_\alpha}{2} (5kT + m_\alpha v^2) \end{aligned}$$

с начальными и граничными условиями:

$$\begin{aligned} n_e(t=0, x) &= n_e^*(x), & n_\alpha(t=0, x) &= n_\alpha^0, & v(t=0, x) &= 0, & p(t=0, x) &= P_0 \\ n_e(t, x \rightarrow -0, +\infty) &= 0, & n_\alpha(t, x \rightarrow +\infty) &= n_\alpha^0, & v(t, x \rightarrow 0, +\infty) &= 0, & p(t, x \rightarrow +\infty) &= P_0 \end{aligned}$$

где  $n_\alpha$  - тяжелые компоненты газоразрядной плазмы (молекулы в различных электронно-колебательных состояниях и ионы),  $p$  и  $T$  - давление и температура газа,  $v$  - скорость газа,  $D_e$  - коэффициент амбиполярной диффузии электронов, члены в правых частях уравнений непрерывности  $\Psi$  описывают изменения концентраций соответствующих частиц вследствие протекания химических процессов в газе,  $Q$  - источник, описывающий релаксационный нагрев газа,  $m_\alpha$  - массы частиц,  $k$  - константа Больцмана.

Структура кинетической схемы.

Кинетическая схема, используемая для описания неравновесного электрического разряда в молекулярном азоте, в условиях значительного вложе-

ния энергии во внутренние степени свободы молекул, включает в себя набор реакций между следующими компонентами плазмы:

Колебательные уровни основного электронного терма молекулы  $N_2$ :

$$N_2(X^1\Sigma_g^+, v) \quad (v=0, \dots, 47)$$

Электронно-возбужденные молекулы азота:

$$N_2(A^3\Sigma_u^+, v=0-3), N_2(A^3\Sigma_u^+, v=4-7); N_2(B^3\Pi_g), N_2(W^3\Delta_u), N_2(B'^3\Sigma_u^-);$$

$$N_2(a'^1\Sigma_u^-), N_2(a'^1\Pi_g), N_2(w^1\Delta_u); N_2(C^3\Pi_u).$$

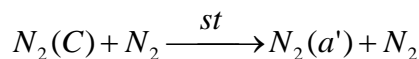
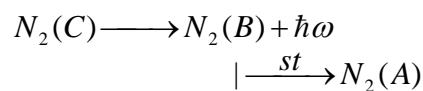
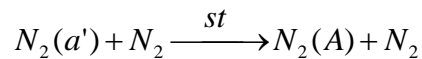
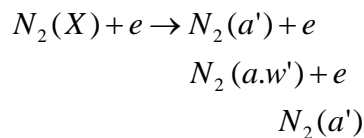
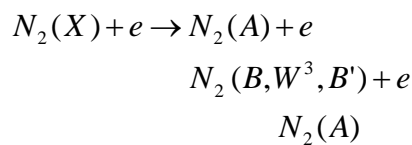
Электроны и ионы  $N_2^+$  и  $N_4^+$ .

В рассматриваемой кинетической модели зарядовая кинетика определяется не только процессами прямой и ступенчатой ионизации, а также процессами ассоциативной ионизации метастабильных состояний молекул:

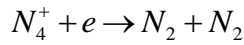
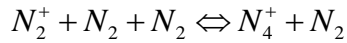
$$N_2(X) + e \rightarrow N_2^+ + 2e, \quad N_2(A) + e \rightarrow N_2^+ + 2e, \quad N_2(a') + e \rightarrow N_2^+ + 2e$$

$$N_2(A) + N_2(a') \rightarrow N_4^+ + e, \quad N_2(a') + N_2(a') \rightarrow N_4^+ + e$$

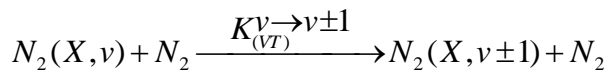
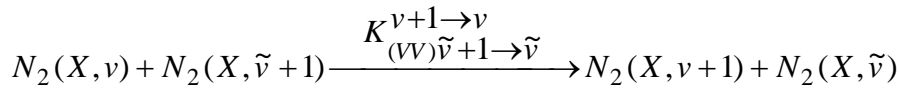
Заселение метастабильных состояний  $A^3\Sigma_u^+$  и  $a'^1\Sigma_u^-$  происходит как за счет непосредственного возбуждения молекул  $N_2(X^1\Sigma_g^+)$ , так и за счет процессов тушения более высоких уровней невозбужденными молекулами.



Содержание ионов  $N_4^+$  и  $N_2^+$  в плазме определяется реакциями конверсии и диссоциативной рекомбинации:

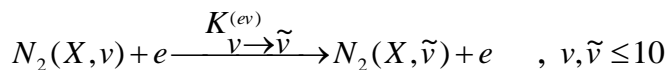


Колебательная кинетика молекул азота в основном электронном состоянии  $N_2(X^1\Sigma_g^+, v) \equiv N_2(X, v)$  (где  $v$  - колебательное квантовое число) описывается в рамках модели поуровневой кинетики ангармонических осцилляторов, учитывающей колебательно-колебательные (VV) и колебательно-поступательные (VT) процессы, в приближении одноквантовых переходов:



здесь  $N_2$  - молекула азота в основном электронном состоянии с произвольным колебательным состоянием. В рассматриваемой модели учитываются 48 колебательных энергетических уровней ( $v=0, \dots, v^*=47$ ) молекулы азота.

При описании возбуждения и девозбуждения колебательных уровней молекулы  $N_2$  электронным ударом учитываются перекрестные переходы между первыми 11 колебательными состояниями:



Функция распределения молекул азота по колебательным уровням основного электронного состояния формируется за счет неупругих столкновений молекулы  $N_2(X, v)$  с электронами и другими молекулами  $N_2$ . При неупругом столкновении двух молекул  $N_2$  учитываются процессы, в которых происходит возбуждение одной их молекул и девозбуждение второй молекулы VV-обмены, а также процессы, протекающие с возбуждением и девозбуждением одной из молекул VT-релаксация. В рассматриваемой модели диссоциацией сильно колебательно-возбужденных молекул при соударениях их с другими молекулами пренебрегается. При неупругих столкновениях мо-

лекулу  $N_2$  с электронами происходит накачка энергии в колебательный резервуар молекул  $N_2(X, \nu)$   $ev$ -процессы, а также процессы возбуждения электронных термов молекулы, диссоциация и ионизация молекул, которые описываются источником членом  $\Phi_\nu$ .

Таким образом, система уравнений, описывающая колебательную кинетику молекул азота, записывается в виде:

$$\frac{dn_{N_2(X, \nu)}}{dt} = \left( \frac{\partial n_{N_2(X, \nu)}}{\partial t} \right)^{(VV)} + \left( \frac{\partial n_{N_2(X, \nu)}}{\partial t} \right)^{(VT)} + \left( \frac{\partial n_{N_2(X, \nu)}}{\partial t} \right)^{(ev)} - \Phi_\nu, \quad \nu = 0, \dots, \nu^*,$$

где:

$$\left( \frac{\partial n_{N_2(X, \nu)}}{\partial t} \right)^{(VT)} = -(\Pi_\nu^{(VT)} - \Pi_{\nu-1}^{(VT)}), \quad \left( \frac{\partial n_{N_2(X, \nu)}}{\partial t} \right)^{(VV)} = -(\Pi_\nu^{(VV)} - \Pi_{\nu-1}^{(VV)}),$$

здесь  $\Pi_\nu^{(VT)}$  и  $\Pi_\nu^{(VV)}$  - потоки молекул вдоль оси колебательных квантовых чисел, вызванные VT- и VV- процессами:

$$\Pi_\nu^{(VT)} = n_{N_2} \left( K_{(VT)}^{\nu \rightarrow \nu+1} n_{N_2(X, \nu)} - K_{(VT)}^{\nu+1 \rightarrow \nu} n_{N_2(X, \nu+1)} \right),$$

$$\Pi_\nu^{(VV)} = n_{N_2(X, \nu)} \sum_{i=1}^{\nu} K_{(VV), i \rightarrow i-1}^{\nu \rightarrow \nu+1} n_{N_2(X, i)} - n_{N_2(X, \nu+1)} \sum_{i=0}^{\nu-1} K_{(VV), \nu \rightarrow \nu-1}^{i \rightarrow i+1} n_{N_2(X, i)},$$

$$\nu = 0, \dots, \nu^* - 1, \quad n_{N_2} = \sum_{i=0}^{\nu} n_{N_2(X, i)}, \quad \Pi_{\nu^*}^{(VT)} = \Pi_{\nu^*}^{(VV)} = 0.$$

$$\left( \frac{\partial n_{N_2(X, \nu)}}{\partial t} \right)^{(ev)} = \begin{cases} F(\nu)_+^{(ev)} - F(\nu)_-^{(ev)}, & \nu = 0, \dots, 10 \\ 0, & \nu > 10 \end{cases}.$$

Здесь выражения  $F(\nu)_+^{(ev)}$  и  $F(\nu)_-^{(ev)}$  описывают заселение и расселение колебательных состояний молекулы  $N_2$  ударом электрона:

$$F(\nu)_+^{(ev)} = n_e \sum_{\substack{i=0 \\ i \neq \nu}}^{10} K_{i \rightarrow \nu}^{(ev)} n_{N_2(X, i)} \quad \text{и} \quad F(\nu)_-^{(ev)} = n_e n_{N_2(X, \nu)} \sum_{\substack{i=0 \\ i \neq \nu}}^{10} K_{\nu \rightarrow i}^{(ev)}.$$

Источниковый член  $\Phi_\nu$  может быть представлен в виде:

$$\Phi_\nu = \begin{cases} n_e n_{N_2(X, \nu)} \sum_z K_z^e(\nu) - \tilde{\Phi}_\nu, & \nu = 0, \dots, 3 \\ 0, & \nu > 3 \end{cases},$$

где символ  $z$  соответствует электронным состояниям:  $A, B, W^3, B', a', a, w^1, C$ , и

Суммарная скорость тепловыделения в результате протекания реакций в плазме может быть представлена в виде:

$$Q = Q_{e-N_2}^{(elast)} + Q_{e-N_2}^{(RT)} + Q_{(e-N_2)+N_2}^{(ET)} + Q_{N_2-N_2}^{(VV)} + Q_{N_2-N_2}^{(VT)},$$

где слагаемое  $Q_{e-N_2}^{(elast)}$  обусловлено упругим рассеиванием электронов на молекулах;  $Q_{e-N_2}^{(RT)}$  - возбуждением вращательных уровней молекулы  $N_2$  и их быстрой последующей релаксацией;  $Q_{(e-N_2)+N_2}^{(ET)}$  - процессами релаксации (тушения) электронно-возбужденных частиц  $N_2$ ;  $Q_{N_2-N_2}^{(VV)}$  и  $Q_{N_2-N_2}^{(VT)}$  - процессами нерезонансного VV-обмена и VT- релаксации колебательно-возбужденных молекул  $N_2$ .

$$Q_{e-N_2}^{(elast)} = n_e \left( \frac{2}{m_e} \right)^{1/2} \int_0^\infty \frac{2m_e}{m_{N_2}} n_{N_2(X)} \sigma_{N_2(X)}^{(tr)}(\varepsilon) \left( f(\varepsilon) + kT_g \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) \varepsilon^2 d\varepsilon,$$

где  $m_e$  и  $m_{N_2}$  - массы электрона и молекулы азота;  $\sigma_{N_2(X)}^{(tr)}$  - транспортное сечение рассеяния электрона на молекуле  $N_2(X)$ ;  $f(\varepsilon)$  - функция распределения электронов по энергии (ФРЭЭ);  $k$  - константа Больцмана.

$$Q_{e-N_2}^{(RT)} = 6B_{N_2(X)} n_e n_{N_2(X)} \left( \frac{2}{m_e} \right)^{1/2} \int_0^\infty \sigma_{N_2(X)}^{(rot)}(\varepsilon) \left( f(\varepsilon) + kT_g \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) \varepsilon d\varepsilon,$$

где  $B_{N_2(X)}$  - вращательная постоянная молекулы азота;  $\sigma_{N_2(X)}^{(rot)}$  - сечение возбуждения вращательных уровней основного электронного состояния молекулы азота.

$$Q_{N_2-N_2}^{(VV)} = - \sum_{v=1}^{v^*} E_v \left( \frac{\partial n_{N_2(X,v)}}{\partial t} \right)^{(VV)} = \sum_{v=1}^{v^*} E_v \left( \Pi_v^{(VV)} - \Pi_{v-1}^{(VV)} \right),$$

$$Q_{N_2-N_2}^{(VT)} = - \sum_{v=1}^{v^*} E_v \left( \frac{\partial n_{N_2(X,v)}}{\partial t} \right)^{(VT)} = \sum_{v=1}^{v^*} E_v \left( \Pi_v^{(VT)} - \Pi_{v-1}^{(VT)} \right),$$

где  $E_v = v \cdot (E_1 - (v-1) \cdot \Delta E)$  - энергия  $v$ -го колебательного состояния ангармонического осциллятора;  $E_1$  - энергия первого колебательного уровня;  $\Delta E$  - постоянная ангармонизма.

В случаях интенсивного возбуждения электронных термов при относительно высоких значениях напряженности электрического поля для описания



быстрого нагрева газа включен механизм тепловыделения, связанный с процессами столкновительного девозбуждения электронно-колебательных уровней молекул частицами  $N_2$  в основном состоянии. При этом происходят ступенчатые переходы возбужденных молекул из вышележащих состояний в метастабильные состояния  $N_2(a^1\Sigma_u^-)$  и  $N_2(A^3\Sigma_u^+)$ . Выражение  $Q_{(e-N_2)+N_2}^{(ET)}$  описывает выделение небольших количеств внутренней энергии в поступательные степени свобода в одиночных актах девозбуждения (соответствующим малым значениям параметра Мессе).

Кинетика электронной компоненты плазмы описывается квазистационарным уравнением Больцмана для функции распределения электронов по энергии, записанным в приближении двучленного разложения. Вычисление констант скоростей процессов неупругих столкновений электронов с молекулами осуществляется путем свертки экспериментально (либо теоретически) полученных сечений этих процессов с ФРЭЭ.

В настоящей работе за основу принята база данных по сечениям и константам скоростей элементарных процессов, протекающих с участием электрона в азотной плазме, приведенная в [3].

#### Численная модель

Кинетические характеристики процесса нагрева молекулярного азота, протекающего во время неравновесного электрического разряда и в после разрядный период, описываются жесткой задачей Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Большая жесткая система обыкновенных дифференциальных уравнений решается с помощью специализированной программы DIFSUB с подключением высоко оптимизированного пакета программ Intel<sup>®</sup> Math Kernel Library 5.1.

При расчете констант скоростей протекания элементарных процессов с участием электронов решается уравнение Больцмана для ФРЭЭ, представляющее собой нелинейное интегро-дифференциальное уравнение второго порядка со смещенными аргументами. Как показывают расчеты, в условиях рассматриваемой задачи ФРЭЭ не является однопараметрическим распреде-

лением Максвелла и чрезвычайно сильно зависит от отношения напряженности электрического поля к концентрации молекул азота  $E_{eff}/n_{N_2}$ , а также от состояния внутренних степеней свободы молекул (в частности от степени возбуждения колебаний молекул).

В данной работе во избежание чрезмерных затрат машинного времени (чрезмерных даже для одномерных задач, описывающих динамику неравновесной среды) проводится предварительный расчет ФРЭЭ и табулирование констант скоростей процессов как функций от величин  $E_{eff}/n_{N_2}$  и  $S$  (где

$$S = \frac{1}{\hbar\omega_0 \cdot n_{N_2}} \sum_{v=1}^{v^*} E_v n_{N_2(X,v)} - \text{среднее число колебательных квантов, приходящихся на одну молекулу).}$$

Полученные константы скоростей процессов (в широком диапазоне параметров  $10^{-16} \leq E_{eff}/n_{N_2} \leq 3 \cdot 10^{-15}$ ,  $0 \leq S \leq 5$ ) аппроксимировались аналитическими зависимостями вида:

$$\ln(K_Y^{(e)}(\frac{E_{eff}}{n_{N_2}}, S)) = \sum_{i=0} \sum_{j=0} \alpha_{i,j} \left( \left( 10^{16} \frac{E_{eff}}{n_{N_2}} \right)^{\beta_Y} \right)^i (S^{\delta_Y} + a)^j,$$

что позволило снизить затраты машинного времени на несколько порядков величины.

Уравнения газодинамики решались на основе хорошо зарекомендовавшей себя полностью консервативной частично-трехслойной разностной схемы (ПКС-1) [5].

Решение уравнения электродинамики и формулировка граничных условий подробно описаны в [4].

Обсуждение тестовых результатов.

В качестве примера рассмотрим эффект воздействия плоской электромагнитной волны с амплитудой  $E_0 = 10^4 V/cm$  и длиной волны  $\lambda = 1cm$  на покоящийся молекулярный азот при высоком давлении ( $n_{N_2} = 10^{19} cm^{-3}$ ). Начальная предионизация газа осуществляется в области  $0 < x < 2cm$ , где внешний источник ионизации поддерживает концентрацию электронов на уровне  $n_e \approx 10^5 cm^{-3}$ .

Электромагнитная волна, проходя через радиопрозрачную поверхность (при  $x=0$ ) частично поглощается слабоионизованной плазмой, вызывая там лавинное размножение электронов – развитие газового разряда. Электронная компонента возбуждает внутренние степени свободы молекул: электронные уровни, вращение и колебания молекул. С течением времени релаксация внутренней энергии молекул приводит к нагреву газа и его движению.

На рисунке 1 в момент времени  $\tau = 50$  мкс приведены графики зависимостей амплитуды электрического поля и концентрации электронов в пространстве. На рисунках 2 и 3 даны зависимости среднего числа колебательных квантов приходящихся на одну молекулу  $S$  и представлена динамика газа в различные моменты времени  $\tau = 20, 30, 40$  и  $50$  мкс.

Из приведенных данных видно, что за короткий промежуток времени  $t \sim 5$  мкс вблизи радиопрозрачной стенки ( $x=0$ ) формируется узкая область ( $\Delta x \sim 0,1-0,5$  см) с концентрацией электронов близкой к критической. В этой области происходит основное поглощение энергии волны, наиболее сильное возбуждение внутренних степеней свободы молекул, интенсивный нагрев газа (определяющий быстрый разлет газа).

## Л и т е р а т у р а

1. Силаков В.П., Чеботарев А.В. Стабильные режимы неравновесного импульсно-периодического разряда в потоке молекулярного азота при высоком давлении. ПМТФ, 1992, N2, с. 19-26.
2. Богатов Н.А., Гитлин М.С. Экспериментальное исследование неустойчивости несамосогласованного СВЧ- разряда. ЖТФ, 1987, т. 57, N 1.
3. Русанов В.В., Силаков В.П., Чеботарев А.В. Кинетические характеристики процесса нагрева молекулярного азота, протекающего во время неравновесного электрического разряда и в послеразрядный период. –Препринт ИПМ N42/
4. Безменов И.В., Русанов В.В., Силоков В.П. Динамика волнового СВЧ-разряда высокого давления в молекулярном азоте. – Труды ИОФРАН, т. 47, 1994, с. 74-107.
5. Вычислительные методы в математической физике. Под редакцией А.А. Самарского. Издательство Московского Университета 1986.

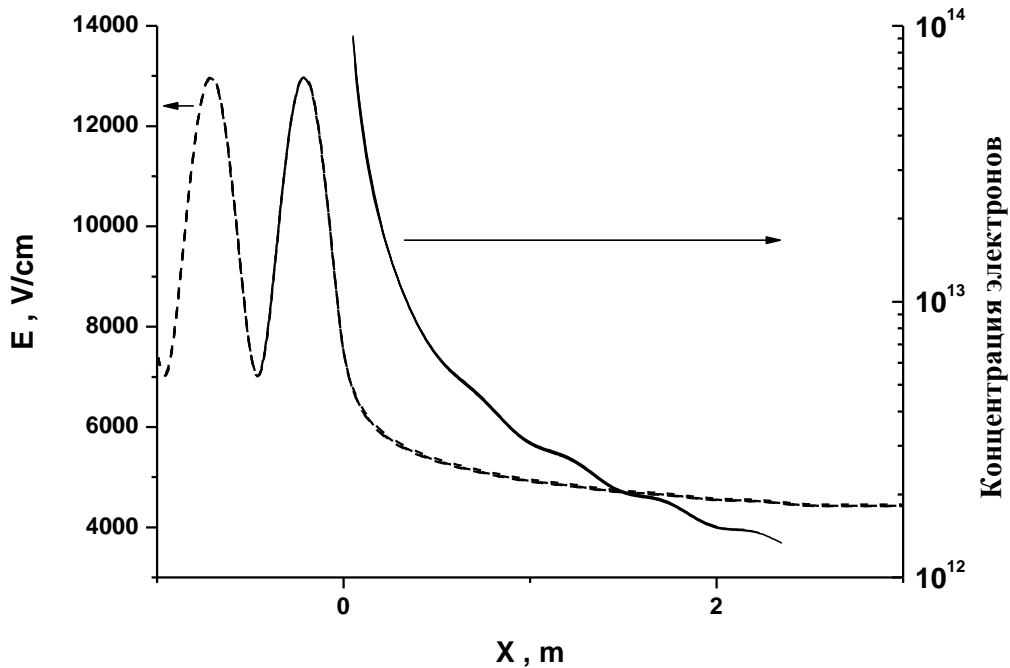


Рис. 1

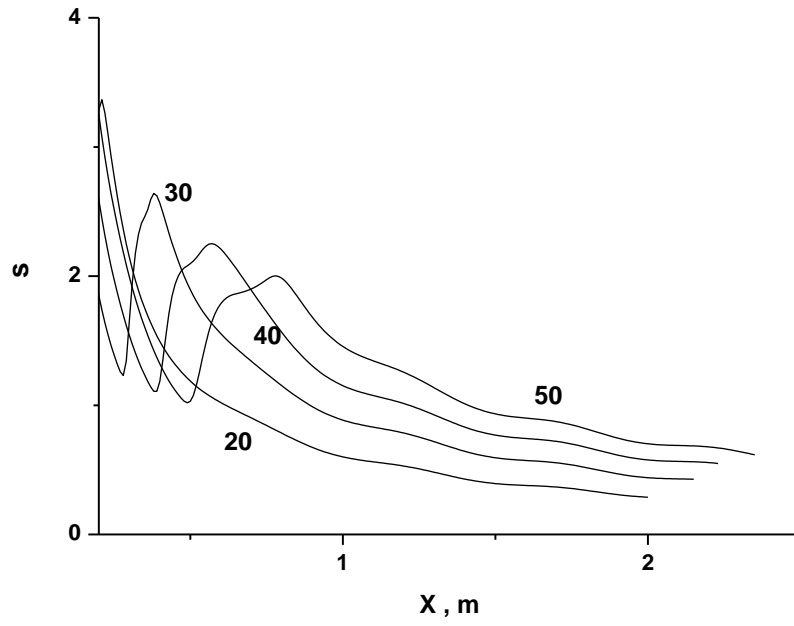


Рис. 2

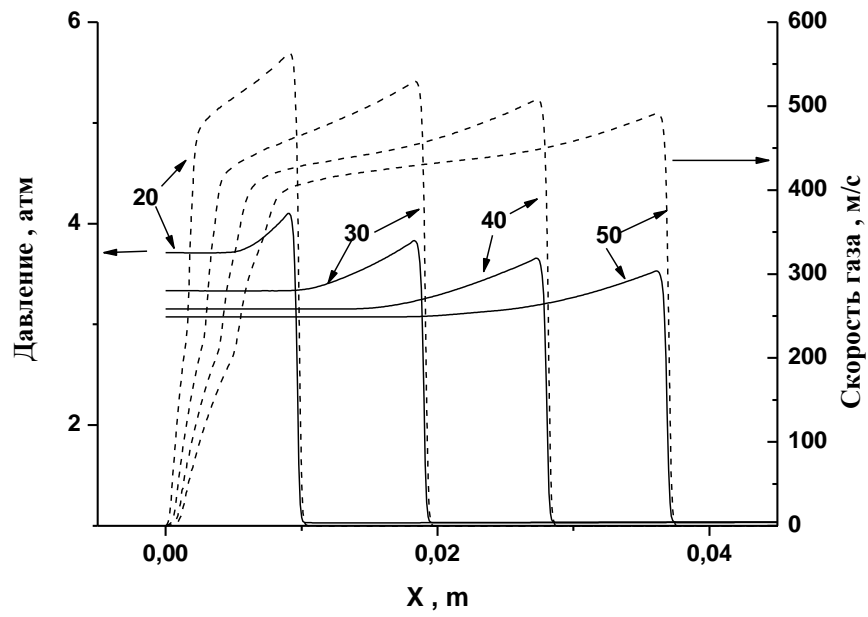


Рис. 3