
УДК 539.17 – 539.19;539.92

Расчёт заселённостей аргона в проточной дуге

Войницкий С. О., Скороход Е.П.

В рамках метаравновесной модели двухтемпературной квазистационарной плазмы рассчитаны распределения возбуждённых состояний аргона. Результаты расчёта согласуются с экспериментами И.В.Подмошенского, Н.Shindo и S.Imazu.

распределения возбуждённых состояний в плазме аргона, многоуровневая кинетика плазмы аргона, диаграммы метаравновесных состояний, оптическая диагностика плазменных потоков.

Введение

Многие газовые разряды, например, дуговые, сверхзвуковые плазменные струи, капиллярные разряды с испаряющейся стенкой (КРИС), ВЧ индукционные разряды, характеризуются неоднородностью распределений электронов по энергиям. Кроме того, заселённость возбуждённых и заряженных частиц не подлежит описанию по формуле Больцмана, а ионный состав не определяется по формуле Саха. В этих случаях заселённости возбуждённых и заряженных частиц можно получить лишь, решая систему уравнений баланса заселения и опустошения уровней.

Определение компонентного состава плазмы можно проводить в рамках разных математических моделей [1-13,19,20]. В данной работе использовалась модель многоуровневой кинетики квазистационарной неравновесной плазмы [2,10,12,13]. Примечательным результатом такого подхода являются диаграммы метаравновесных состояний. В математике общепринято рассматривать фазовые диаграммы, устанавливающие взаимосвязь между отдельными искомыми решениями и другими параметрами правых частей уравнений. В нашем же случае все полученные решения (заселённости многих состояний) просуммированы и получены «физические» зависимости концентраций электронов от суммы искоемых решений. Эти зависимости в работе [2] названы диаграммами метаравновесных состояний.

Отличительной особенностью метаравновесной двухтемпературной плазмы инертных газов является то, что зависимость заселённостей уровней атома от энергии возбуждения уровней в графическом представлении является ломанной (в логарифмическом масштабе). Каждой точке диаграммы метаравновесных состояний соответствуют распределения заселённостей возбуждённых состояний атома. Такие распределения доступны для экспериментальных проверок. В работе используются результаты экспериментов Н.Shindo и S.Imazu, И.В. Подмошенского, а также значения Y.Vičheka для сравнения расчетных данных с экспериментальными.

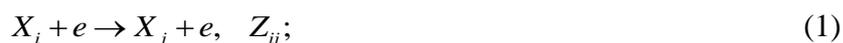
Интерес к работам в данном направлении, проявившийся еще в XX веке не только не уменьшился сегодня, но, наоборот возрастает. В первую очередь это связано с развитием плазмохимии и нанотехнологий.

1. Алгоритм модели многоуровневой кинетики квазистационарной неравновесной плазмы. Диаграммы метаравновесных состояний.

Подробная теория по кинетике столкновительно-излучательных процессов в низкотемпературной квазиравновесной плазме инертных газов изложена в работе [2]. Для более углубленного изучения и ознакомления с задачами и проблемами процессов физической и химической кинетики низкотемпературной плазмы и их численного моделирования рекомендованы публикации [3–10].

При решении задач многоуровневой кинетики [2,10,12,13,23], система кинетических уравнений записывается для следующих реакций:

– взаимодействие с электронами (\hat{Z} – матрица, учитывающая возбуждение и девозбуждение электронным ударом; \vec{ZO} – вектор констант скоростей ионизации; \vec{T} – вектора констант скоростей тройной рекомбинации):



– взаимодействие с фотонами (\hat{A} – матрица вероятностей фотопереходов; \vec{FO} , \vec{F} – векторы скоростей фотоионизации и фоторекомбинации):

$$X_i \rightarrow X_j + \hbar\omega, \quad A_{ij}; \quad (4)$$

$$X_i + \hbar\omega \rightarrow X^+ + e, \quad FO_i; \quad (5)$$

$$X^+ + e \rightarrow X_j + \hbar\omega, \quad F_j; \quad (6)$$

– образование и распад молекулярного иона $M^+ \equiv X_2^+$ ($\vec{\alpha}_1$ – вектор скоростей ассоциативной ионизации, $\vec{\alpha}_2$ – вектор скоростей диссоциативной рекомбинации, α_3 – константа скорости образования молекулярного иона, реакция конверсии):

$$X_i + X_1 \rightarrow M^+ + e, \quad (\alpha_1)_i; \quad (7)$$

$$M^+ + e \rightarrow X_j + X_1, \quad (\alpha_2)_j; \quad (8)$$

$$X^+ + 2X_1 \rightarrow M^+ + X_1, \quad \alpha_3. \quad (9)$$

В [2,10,12,13] подробно рассматривается система дифференциальных уравнений многоуровневой кинетики квазистационарной неравновесной плазмы, включающая реакции (1–9). После преобразований система имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{d\vec{X}}{dt} + \hat{V}^{ev} \cdot \vec{X} = -N_e(\hat{ZO} \cdot \vec{X}) - (\vec{FO} \cdot \vec{X}) + N_e \cdot X^+(N_e \vec{T}) + N_e X^+ F - X_1(\alpha_1 \vec{X}) + \vec{\alpha}_2 N_e M^+ \\ \frac{dX^+}{dt} = N_e \left(\vec{ZO} \cdot \vec{X} \right) + \left(\vec{FO} \cdot \vec{X} \right) - N_e X^+ F - N_e^2 X^+ T - \alpha_3 X_1^2 X^+ \\ \frac{dM^+}{dt} = X_1(\vec{\alpha}_1 \cdot \vec{X}) - \alpha_2 N_e M^+ + \alpha_3 X_1^2 X^+. \end{cases} \quad (10)$$

Расчетная система для последующей реализации алгоритма представляется следующим образом:

$$\begin{aligned} X^+ &= \frac{N_e}{1+r} \left(1 - \frac{X_1(\vec{\alpha}_1 \cdot \vec{X})}{\alpha_2 N_e^2} \right), \\ M^+ &= \frac{N_e}{1+r} \left(r + \frac{X_1(\vec{\alpha}_1 \cdot \vec{X})}{\alpha_2 N_e^2} \right), \end{aligned} \quad (11)$$

$$\hat{V}\vec{X} = \frac{N_e^2}{1+r} \left(\vec{F} + N_e \vec{T} + r \vec{\alpha}_2 \right), \quad (12)$$

$$\text{где} \quad \hat{V} = \hat{A} + N_e \hat{Z} + N_e \hat{ZO} + \vec{FO} + X_1(\hat{\alpha}_1 - \vec{a} \otimes \vec{\alpha}_1), \quad (13)$$

$$r = \frac{\alpha_3 X_1^2}{\alpha_2 N_e} . \quad (14)$$

Заселённости всех состояний атома (основного и возбуждённых) записываются в виде вектора состояния $\vec{X} = \begin{Bmatrix} X_1 \\ \dots \\ X_n \end{Bmatrix}$. На этот искомый вектор действует релаксационная

матрица, а в правой части собраны рекомбинационные процессы как функции источника.

Результатом численного решения системы нелинейных уравнений многоуровневой кинетики (12–14) являются значения концентраций возбуждённых состояний заданного числа уровней. Все полученные решения (значения компонент искомого вектора \vec{X}) суммируются, вычисляется общее число ядер NO и строятся зависимости концентрации электронов N_e от NO . Такие зависимости названы диаграммами метаравновесных состояний [2]. Они устанавливают однозначное соответствие между тремя параметрами: плотностью газа, концентрацией электронов и температурой электронов.

На рис.1–4 представлены диаграммы метаравновесных состояний аргона для значений температур электронов $T_e = 0,9$ эВ и $T_e = 1,0$ эВ. Были рассмотрены два предельных случая: случай оптически тонкой плазмы, когда параметр Бибермана-Холстейна [4] $\theta = 1$ (рис.1–2), и оптически плотной плазмы – $\theta = 0$ (рис.3–4).

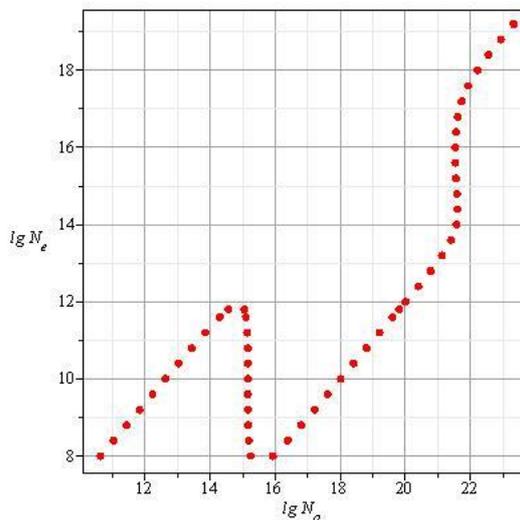


Рис.1. Диаграмма метаравновесных состояний Ar. $T_e=0.9$ эВ. Тонкая плазма.

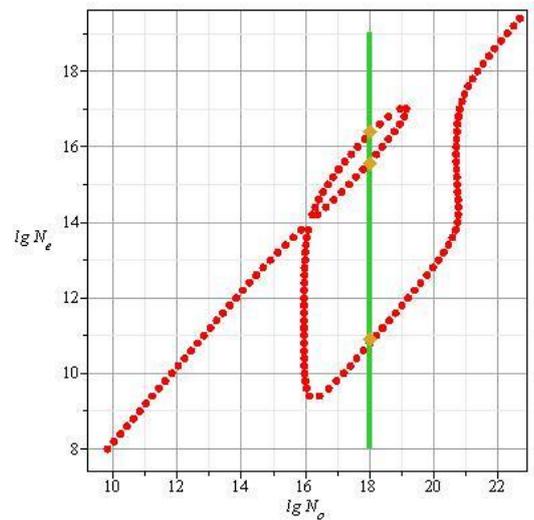


Рис.2. Диаграмма метаравновесных состояний Ar. $T_e=1.0$ эВ. Тонкая плазма.

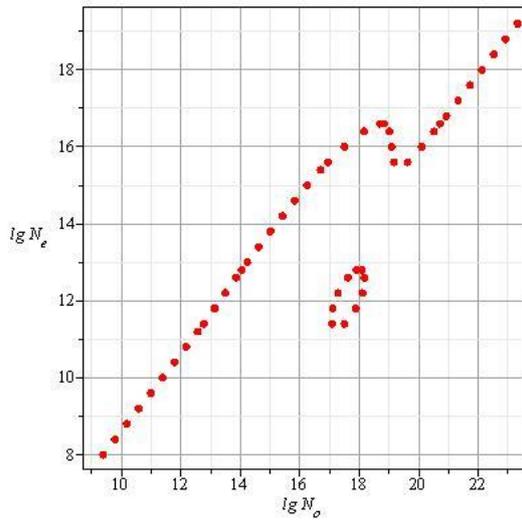


Рис.3. Диаграмма метаравновесных состояний Ag. $T_e=0.9$ эВ. Плотная плазма.

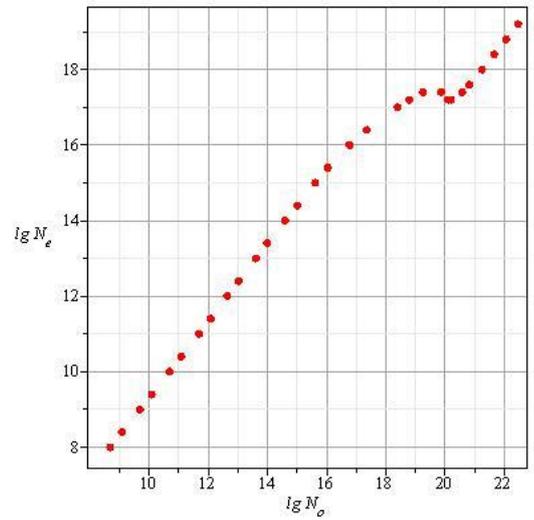


Рис.3. Диаграмма метаравновесных состояний Ag. $T_e=1.0$ эВ. Плотная плазма.

Проанализируем неоднозначность полученных результатов. Рассмотрим нетрадиционную область («петлю») диаграммы метаравновесных состояний (рис.2) вдоль прямой, параллельной ординате, при заданной температуре электронов $T_e=1.0$ эВ для выбранного значения плотности (концентрации ядер) $NO = 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Имеем три значения для концентрации электронов: 1) верхнее значение $N_e = 2.51 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$; 2) среднее – $N_e = 3.01 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$; 3) нижнее – $N_e = 6.16 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$. Первое значение соответствует модели локального термодинамического равновесия (ЛТР); второе – характеризует столкновительно-излучательное метаравновесие (СИМР), присущее двухтемпературной квазистационарной («микросекундной») плазме; третье – корональный предел. Каждая точка на диаграмме отвечает определенным параметрам плазмы и описывает ее состояние в условиях квазистационара на достаточно малых временах.

2. Распределения возбуждённых состояний. Эксперимент H.Shindo и S.Imazu. Расчёты Y.Vlcheka.

Важным моментом в понимании многоуровневой кинетики инертных газов являются распределения возбуждённых состояний (РВС) атома по уровням от их энергий. Отличительной особенностью метаравновесной двухтемпературной плазмы инертных газов является то, что зависимость заселённости уровней атома от энергии возбуждения является ломанной (в логарифмическом масштабе), в отличие от РВС в состоянии локального термодинамического равновесия (ЛТР), которые представляют собой «больцмановские» прямые. Заселённость уровня или концентрация атомов в i -ом

состоянии есть i -ая компонента вектора \vec{X} (12). Каждой точке на диаграммах (рис.1-4) соответствуют распределения заселённостей возбуждённых состояний атома. Такие распределения доступны для экспериментальных проверок.

На рис.5 представлены данные эксперимента Н.Shindo и S.Imazu [18] (отмечены символом \bullet), в котором спектральными методами определялась интенсивность линий аргона в атмосферной дуге диаметром $D=0,3$ см и давлении $P=500$ Торр. Также на рис.5 приведены расчёты заселённостей Y.Vlček [20]: штриховая линия соответствует следующим параметрам – температура электронов равна температуре атомов $T_e = T_a = 10\ 800$ К, концентрация электронов – $N_e = 2.89 \cdot 10^{16}$ см $^{-3}$; сплошная линия – $T_e = T_a = 12\ 000$ К, $N_e = 2.89 \cdot 10^{16}$ см $^{-3}$; штрихпунктирная линия построена при аналогичных температурах ($T_e = T_a = 12\ 000$ К), но концентрация электронов равна $N_e = 2.5 \cdot 10^{16}$ см $^{-3}$.

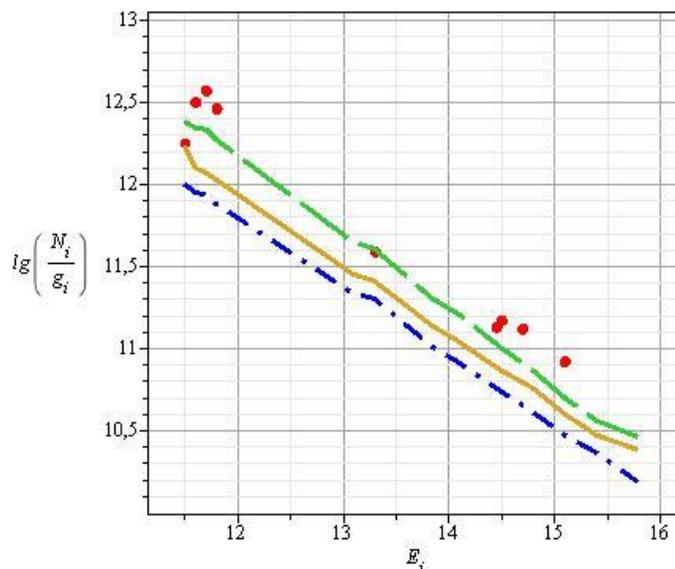


Рис.5 Экспериментальные данные Н.Shindo и S.Imazu [18]. Расчёты заселённостей Y.Vlček [20].

Y.Vlček произвёл расчёты заселённостей в рамках модели многоуровневой кинетики [19] (применялась схема уровней $N=64$). Следует отметить, что в своих работах он использует реакции (1–6), но не учитывает влияние диссоциативной рекомбинации молекулярных ионов, а вводит в рассмотрение уход метастабилей на стенку.

В нашей работе учет диссоциативной рекомбинации является принципиальным, так как влияние данного параметра на модель многоуровневой кинетики квазистационарной неравновесной плазмы весьма существенно. Нетрадиционная область гистерезисного характера ("петля") является лучшим подтверждением того (рис.2).

В наших расчетах использовалась схема уровней, представленная в табл.1 (число уровней N=38). Указаны : спектроскопические символы, стат.веса, значения энергий возбуждённых состояний аргона и значения эффективного квантового числа. Основное состояние – $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 1S_0$, потенциал ионизации I=15,760 эВ.

Таблица 1.

Энергии и эффективные главные квантовые числа Ar, N=38.

№	n[KJ]	g	E	n*
1	5p ¹ S ₀	1	0.000	1.059
2	6s[3/2] ₂	5	8.315	1.889
3	6s[3/2] ₁	3	8.436	1.919
4	6p[1/2] ₁	3	9.579	2.310
5	6p[5/2] ₂	5	9.685	2.359
6	6p[5/2] ₃	7	9.720	2.376
7	6p[3/2] ₁	3	9.789	2.411
8	6p[3/2] ₂	5	9.820	2.427
9	5d[1/2] ₀	1	9.890	2.465
10	5d[1/2] ₁	3	9.917	2.480
11	6p[1/2] ₀	1	9.933	2.489
12	5d[7/2] ₄	9	9.943	2.494
13	5d[3/2] ₂	5	9.959	2.497
14	5d[7/2] ₃	7	10.039	2.551
15	5d[5/2] ₂	5	10.157	2.626
16	5d[5/2] ₃	7	10.220	2.669
17	5d[3/2] ₁	3	10.401	2.805
18	7s[3/2] ₂	5	10.562	2.946
19	7s[3/2] ₁	3	10.593	2.976
20	7p[1/2] ₁	3	10.901	3.328
21	7p[5/2] ₂	5	10.954	3.402
22	7p[5/2] ₃	7	10.969	3.423
23	6d[1/2] ₀	1	10.971	3.427
24	6d[1/2] ₁	3	10.978	3.438
25	7p[3/2] ₂	5	10.996	3.464
26	6d[3/2] ₂	5	10.998	3.468
27	7p[3/2] ₁	3	11.003	3.475
28	7p[1/2] ₀	1	11.015	3.493
29	6d[7/2] ₄	9	11.024	3.507
30	6d[7/2] ₃	7	11.037	3.529
31	6d[5/2] ₂	5	11.064	3.574
32	6d[5/2] ₃	7	11.101	3.636
33	6d[3/2] ₁	3	11.163	3.750
34	4f	56	11.270	3.984
35	8s	8	11.289	4.028
36	8p	24	11.439	4.446
37	7d	40	11.475	4.567
38	5f	56	11.580	4.986

Сравним рассчитанные в рамках описанной нами модели многоуровневой кинетики квазистационарной неравновесной плазмы РВС, представленные на рис.6-8, с результатами [18,20]. К решению задачи будем подходить поэтапно. Задавая температуру электронов T_e , концентрацию электронов N_e и параметр Бибермана-Холстейна (выбор оптически тонкой или плотной плазмы), мы получаем значения плотности ядер (концентраций NO). Далее необходимо выбрать соответствующую плотность ядер и построить искомым вектор заселённостей.

Для оптически тонкой плазмы при $T_e = 0.9$ эВ = 10 440 К и $N_e = 2.51 \cdot 10^{16}$ см⁻³ получаем плотность ядер $NO = 3.63 \cdot 10^{21}$ см⁻³ (рис.1). Этот случай не подходит в силу большого значения плотности ядер. Расчёты для оптически плотной плазмы при аналогичных параметрах ($T_e = 0.9$ эВ, $N_e = 2.51 \cdot 10^{16}$ см⁻³) дают три значения для плотности (концентрации) ядер: 1) $NO = 1.44 \cdot 10^{18}$ см⁻³; 2) $NO = 1.25 \cdot 10^{19}$ см⁻³; 3) $NO = 3.23 \cdot 10^{20}$ см⁻³ (рис.3). Третье значение нам не подходит в силу большого значения. Построим вектор заселённостей для первого и второго значений плотности ядер и сопоставим результаты с данными эксперимента Н.Shindo и S.Imazu [18], а также со штриховой линией в расчетах Y.Vlčekеа [20] (рис.6).

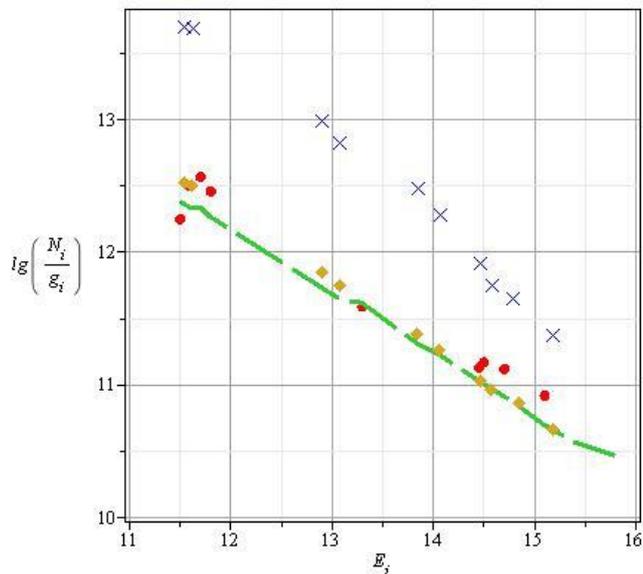


Рис.6. Сравнение полученных нами результатов с экспериментальными данными Н.Shino и S.Imazu. Символом ● обозначены данные эксперимента [18]; штриховая линия – расчеты Y.Vlčekеа [20]. Наши расчеты, плотная плазма, $T_e = 0.9$ эВ: символ ◆ – значения вектора заселённости, плотность ядер $NO = 1.44 \cdot 10^{18}$ см⁻³; символ × – значения вектора заселённости, плотность ядер $NO = 1.25 \cdot 10^{19}$ см⁻³.

Как видно из рис.6 лучше сочетаются с данными эксперимента Н.Shindo и S.Imazu значения вектора заселённости при $T_e = 0.9$ эВ, концентрации электронов $N_e = 2.51 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ и плотности ядер $NO = 1.44 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, плазма – оптически плотная. Проведем соответствующую оценку температуры газа $T_{газа}$ в данном случае с помощью известной формулы $p = \sum NO \cdot k \cdot T_{газа}$. Учитывая, что давление в эксперименте было $p = 500$ Торр, получаем температуру газа, равную $T_{газа} \approx 3282$ К.

Проведем расчёты заселённости при температуре электронов $T_e = 1.0$ эВ и концентрации $N_e = 2.51 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Для оптически тонкой плазмы при заданных параметрах получаем следующие значения для плотности ядер: 1) $NO = 3.98 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$; 2) $NO = 5.75 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$; 3) $NO = 5.12 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ (рис.2). Третье полученное значение плотности ядер не подходит в силу большого значения. Построим вектор заселённости для первых двух значений плотности ядер и сопоставим результаты с данными эксперимента Н.Shindo и S.Imazu [18], а также со штрихпунктирной линией в расчетах Y.Vlčheka [20] (рис.7).

Расчёты для оптически плотной плазмы ($T_e = 1.0$ эВ и $N_e = 2.51 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$) дают плотность ядер $NO = 2.29 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ (рис.4). Построим соответствующий вектор заселённости (рис.7).

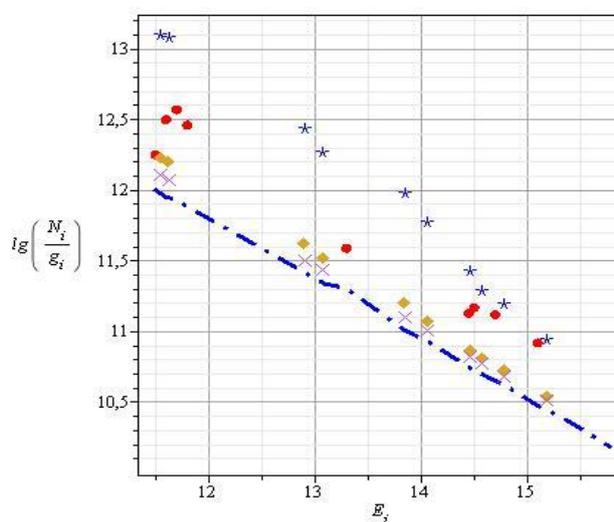


Рис.7. Сравнение полученных нами результатов с экспериментальными данными Н.Shino и S.Imazu. Символом ● обозначены данные эксперимента [18]; штрихпунктирная линия – расчёты Y.Vlčheka [20]. Наши результаты, $T_e = 1.0$ эВ: символ ◆ – значения вектора заселённости, плотность ядер $NO = 3.98 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, тонкая плазма; символ * – значения вектора заселённости, плотность ядер $NO = 5.75 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, тонкая плазма; символ × – значения вектора заселённости, плотность ядер $NO = 2.29 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, плотная плазма.

Как видно из рис.7 лучше сочетаются с данными эксперимента Н.Shindo и S.Imazu значения вектора заселённости при $T_e = 1.0$ эВ, концентрации электронов $N_e = 2.51 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ и плотности ядер $NO = 3.98 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $T_{\text{газа}} \approx 1197 \text{ К}$, плазма – оптически тонкая.

На рис.8 представлены данные эксперимента Н.Shindo и S.Imazu [18] и значения векторов заселенностей для двух случаев: 1) $T_e = 10\,440 \text{ К}$, $N_e = 2.51 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, $NO = 1.44 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $T_{\text{газа}} = 3282 \text{ К}$, плазма – оптически плотная (значения вектора заселённости отмечены символом ■); 2) $T_e = 11600 \text{ К}$, $N_e = 2.51 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, $NO = 3.98 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $T_{\text{газа}} = 1197 \text{ К}$, плазма – оптически тонкая (значения вектора заселённости отмечены символом ×).

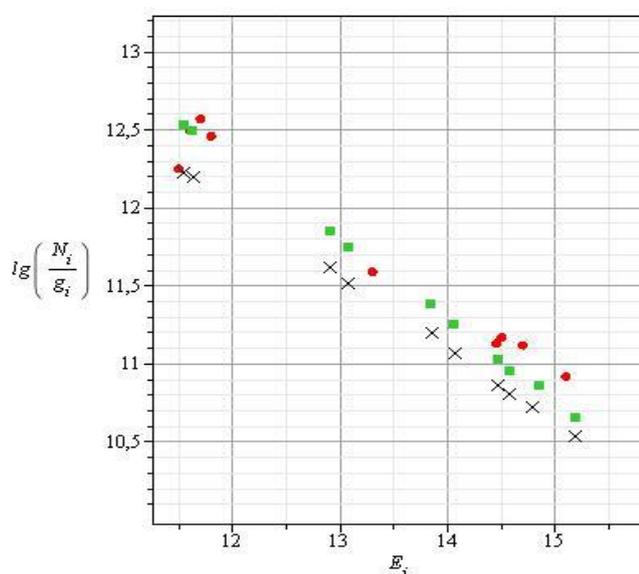


Рис.8. Сравнение полученных результатов с экспериментальными данными Н.Shino и S.Imazu. Символом ● обозначены данные эксперимента [18]. Наши результаты: символ ■ – значения вектора заселённости для первой расчетной кривой; символом × – значения вектора заселенности для второй расчетной кривой.

Учитывая, что диаметр дуги в эксперименте [18] порядка $\square 0.3 \text{ см}$, из расчетных кривых на рис.8 следует выбрать вариант для оптически плотной плазмы, а именно $T_e = 10\,440 \text{ К}$, $N_e = 2.51 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, $NO = 1.44 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $T_{\text{газа}} = 3282 \text{ К}$.

Оптическая толщина в УФ-диапазоне при коэффициенте поглощения большим, чем 10^2 см^{-1} , равна $\tau \geq 1.5$. В УФ-диапазоне линии согласно нашей модели "заперты" (первая строка матрицы), в остальном диапазоне длин волн – плазма оптически прозрачная.

3. Проточная дуга И.В. Подмошенского.

Исследование механизма возбуждения, ионизации и диссоциативной рекомбинации проводилось в экспериментальных работах [5,15,21,22,24]. В работах [21,22] отмечалась важная роль процессов рекомбинации в зоне разряда, обуславливающих отклонения от ЛТР. Плазма дуги, горящей в атмосфере аргона, может быть неравновесна даже при сравнительно больших концентрациях электронов, порядка больше чем $N_e \sim 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Проводимые в прошлом веке и в какой-то степени уникальные экспериментальные работы окончательно не выявили причин, вызывающих отклонения от термодинамического равновесия ЛТР. Вопрос о том, в каком соотношении находятся заселённости уровней и степень ионизации с температурой электронов, не получил тогда достаточного разрешения. Хотелось бы отметить, что в рамках модели столкновительно-излучательного метаравновесия [10,13] найдены объяснения существующим в квазистационарных условиях отклонениям от ЛТР.

В экспериментах с проточной дугой И.В.Подмошенского [21,22] объектом исследования была плазма аргона с вытяжкой газа со стороны электродов. Холодный газ втягивался в канал разряда, нагревался, ионизовался и после прохождения через канал вытягивался через сопло на электроды (проточная дуга). Дуга помещалась в камеру, в которую непрерывно поступал аргон. Давление изменялось от 50 до 760 мм. рт. ст., сила тока от 7 до 30 А, скорость продува от 200 до 1000 л/ч. Получены спектры в области длин волн от 250 до 850 нм. Реализуется только спектр AgI с энергиями возбуждения линий от 13 до 15.5 эВ (табл. 2). При атмосферном давлении достаточно интенсивен сплошной спектр, с понижением давления интенсивность его падает быстрее, чем линий.

Заселённость возбуждённых уровней и температура возбуждения находились путём измерения абсолютной интенсивности излучения спектральных линий, связанных с переходами (табл.2). Линии не реабсорбированы. В табл.2 приведены: длины волн; спектроскопическое обозначение перехода в jl – связи; энергия возбуждения; вероятность фотоперехода из [21]; вероятность фотоперехода из [2]; заселённости в дуге (во время прохождения импульса), полученные в [21]; те же заселённости с учетом фотопереходов из [2] и заселённости в послесвечении из [21]. Приводимые значения соответствуют спектрам, полученным для дуги при 5 А, атмосферном давлении и продувке 300 л/ч.

При силе тока $I = 5 \text{ А}$ и атмосферном давлении концентрация электронов, измеренная по ширине линий H_{β} оказалась равной $N_e = 3.2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$; по сплошному спектру – $N_e = 2.7 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$.

Экспериментальные данные И.В.Подмошенского.

λ , нм	Переход	E_n , эВ	$A_{nm} \cdot 10^{-7}$ сек ⁻¹ [21]	$A_{nm} \cdot 10^{-7}$ сек ⁻¹ [2]	N_n/g_n см ⁻³ с (дуга) [21]	N_n/g_n см ⁻³ (дуга) с учетом [2]	N_n/g_n см ⁻³ после свечения [21]
811.5	4s[3/2] ₂ ←4p[5/2] ₃	13.07	2.1	3.2	1.23·10 ¹⁰	0.8·10 ¹⁰	7.87·10 ¹⁰
810.4	4s[3/2] ₁ ←4p[3/2] ₁	13.15	2.3	2.8	7.7·10 ⁹	6.3·10 ⁹	5.3·10 ¹⁰
801.5	4s[3/2] ₂ ←4p[5/2] ₂	13.09	0.9	1	8.8·10 ⁹	7.9·10 ⁹	4.4·10 ¹⁰
794.8	4s[1/2] ₀ ←4p[3/2] ₁	13.28	2.0	-	7.0·10 ⁹	-	4.2·10 ¹⁰
750.4	4s[1/2] ₁ ←4p[1/2] ₀	13.47	5.0	4.0	5.5·10 ⁹	6.93·10 ⁹	3.8·10 ¹⁰
430.0	4s[3/2] ₁ ←5p[5/2] ₂	14.50	0.03	0.1	1.3·10 ⁹	3.9·10 ⁸	5.07·10 ⁹
427.2	4s[3/2] ₁ ←5p[3/2] ₁	14.52	0.07	0.2	1.27·10 ⁹	4.4·10 ⁸	4.7·10 ⁹
426.6	4s[3/2] ₁ ←5p[3/2] ₂	14.53	0.03	0.024	1.88·10 ⁹	2.35·10 ⁹	5.83·10 ⁹
425.9	4s[1/2] ₁ ←5p[1/2] ₀	14.73	0.36	0.1	0.95·10 ⁹	3.42·10 ⁹	3.32·10 ⁹
418.2	4s[1/2] ₀ ←5p[1/2] ₁	14.68	0.04	-	1.53·10 ⁹	-	6.12·10 ⁹
415.9	4s[3/2] ₂ ←5p[3/2] ₂	14.53	0.15	0.07	1.18·10 ⁹	2.32·10 ⁹	4.72·10 ⁹
565.0	4p[1/2] ₁ ←5d[1/2] ₀	15.10	0.19	-	8,6·10 ⁸	-	1.89·10 ⁹
560.7	4p[1/2] ₁ ←5d[1/2] ₁	15.12	0.15	-	6.0·10 ⁸	-	1.2·10 ⁹

Эксперименты, проводимые И.В. Подмошенским, уникальны и отличаются особой тщательностью спектроскопических измерений и выбором условий для проводимых экспериментов. Надо полагать, что в эксперименте с проточной дугой плазма приближается к оптически тонкой, поэтому расчеты будем проводить для оптически тонкой плазмы.

Сравним экспериментальные данные И.В. Подмошенского [21] (табл.2) с полученными расчётами в рамках метаравновесной модели (рис.9). Экспериментальный способ измерения заселённостей с использованием абсолютных интенсивностей требует знаний величин вероятностей фотопереходов. Значения вероятностей в [21] отличаются от [2] (табл.2). В связи с этим получаются разные значения заселённостей. На рис.9 представлены значения заселённостей, полученные И.В.Подмошенским (символ ●); значения заселённостей с учетом вероятностей фотопереходов из [2]-символ ◆.

В расчётах использовался ранее применённый алгоритм. Наилучшее совпадение расчётных данных с экспериментальными достигается в следующем случае: температура электронов $T_e = 1$ эВ, концентрация электронов $N_e = 2.51 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ (в эксперименте И.В.Подмошенского измеренная по ширине линий H_β концентрация электронов оказалась равной $N_e = 3.2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$; по сплошному спектру – $N_e = 2.7 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$), плотность ядер $NO = 6.16 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, температура газа $T_{газа} = T_e = 11\,600 \text{ К}$ (на рис.9 рассчитанные заселённости обозначены символом \times).

Также на рис.9 приведены значения заселённостей при следующих параметрах: $T_e = 1.1$ эВ, $N_e = 2.51 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $NO = 3.54 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $T_{газа} = 2046 \text{ К}$ (обозначены символом $*$).

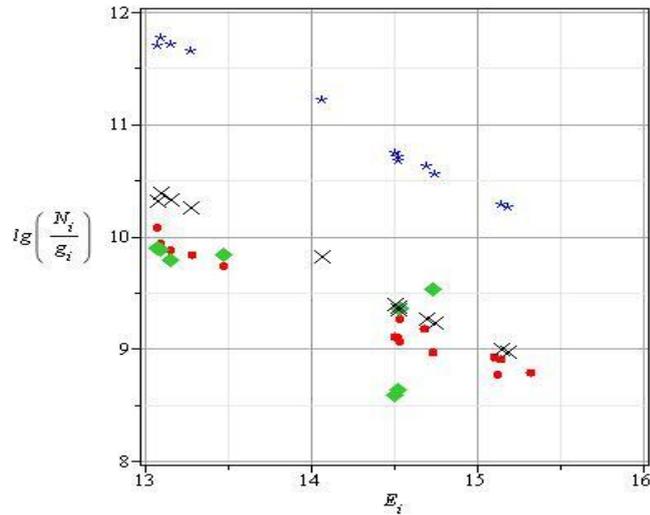


Рис.9. Сравнение расчетных данных с экспериментальными [21]. Символом (●) обозначены заселённости И.В.Подмошенского [21]; те же заселённости с учётом фотопереходов из [2]-обозначены символом ◆.

Наши результаты, тонкая плазма: символом \times обозначены значения вектора заселённостей при $T_e = 1.0$ эВ, $N_e = 2.51 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $NO = 6.16 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, $T_{газа} = 11\,600 \text{ К}$; символом $*$ обозначены значения вектора заселённостей при $T_e = 1.1$ эВ, $N_e = 2.51 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $NO = 3.54 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$; $T_{газа} = 2046 \text{ К}$.

Таким образом, значения заселённостей, полученные в результате решения квазистационарной многоуровневой кинетики в рамках СИМР модели и относящиеся к нетрадиционной области СИМР, при концентрации электронов $N_e < 10^{16}$ группируются в отдельные отрезки с разными наклонами (температурами), образуя ломанную кривую. Эти распределения подтверждены экспериментально в условиях стационарного дугового разряда И.В. Подмошенского и H.Shindo и S.Imazu.

В ходе выполнения работы из расчётов многоуровневой кинетики выбирались случаи, когда заданным концентрациям электронов соответствовали три значения плотности ядер, обуславливающих гистерезисный характер диаграмм метаравновесных состояний, и выбиралось второе значение плотности ядер, соответствующее квазистационарной метаравновесной плазме аргона.

Библиографический список

1. Физико-химическая кинетика и термодинамика. Справочник. // Под ред. Г.Г.Черного и С.А. Лосева. Том 2. – М.: Научно–исследовательский центр механики, 2002, 368 с.
2. Гаврилова А.Ю., Скороход Е.П. «Сечения и константы скоростей плазмохимических реакций инертных газов» М.: Изд-во МАИ, 2010г.
3. Семиохин И.А. Элементарные процессы в низкотемпературной плазме. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1988, 142 с.
4. Биберман Л.М., Воробьёв В.С., Якубов И.Т. Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы. М.: Наука, 1982, 375 с.
5. Диагностика плазмы /(под ред. Хаддлстоуна Р., Леонарда С.). М.: Мир, 1967, 515 с.
6. Гордиец Б.Ф., Осипов А.И., Шелепин Л.А. Кинетические процессы в газах и молекулярные лазеры. М.: Наука, 1980. – 512 с.
7. Гудзенко Л.И., Яковленко С.И. Плазменные лазеры. М.: Атомиздат, 1978, 256 с.
8. Ключарёв А.Н., Янсон М.Л. Элементарные процессы в плазме щелочных металлов. М.: Энергоатомиздат, 1988, 222 с.
9. Полак Л.С., Гольденберг М.Я., Левицкий А.А. Вычислительные методы в химической кинетике. М.: Наука, 1984, 280 с.
10. Киселёв А.Г., Скороход Е.П. Диаграммы состояний ксеноновой плазмы. // В Межвузовском сб. Горение и электродинамические явления. Чебоксары, 1990, с. 104-110.
11. Семиохин И.А., Страхов Б.В., Осипов А.И. Кинетика гомогенных химических реакций. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1986, 232 с.
12. Гаврилова А.Ю., Киселёв А.Г., Скороход Е.П., Станишевская М.Е. Столкновительно-излучательное равновесие в плазме благородных газов.// Мат. Моделирование, 1996, т.8, вып.6, с. 103-108.

13. Скороход Е.П. Спектроскопические методы исследования физико–химических и тепловых процессов в плазменных устройствах..Диссертация доктора т.н. М.: МАИ. 2003, 322 с.; автореферат диссертации д.т.н., 2002, М.: МАИ, 41 с.
14. Вайнштейн Л.А., Собельман И.И., Юков Е.А. Сечения возбуждения атомов и ионов электронами. М.: Наука, 1973, 143 с.
15. Грим Г. Спектроскопия пльзмы. М.: Атомиздат, 1969, 452 с.
16. Трухан Е.П. Расчёт состава многокомпонентной равновесной плазмы. // ДАН БССР, 1968, т.12, вып.5, с. 409 – 431.
17. Аблеков В.К., Калашников Г.Н., Козлов Н.П. и др Расчёт состава плотных многокомпонентных плазм.//В сб. Теплофизические свойства низкотемпературной плазмы (под ред. В.М. Иевлева). М.: Наука, 1976, с.35-38.
18. Shindo H. and Imazu S. J. Quant. Spectrosc.Radiat Transfer // 1980, v.23. p.605
19. Vlcek J. A collisional-radiative model applicable to argon discharges over a wide range of conditions. I: Formulation and basic data.// J. Phys. D: Appl. Phys., 1989, v. 22, p. 623-631.
20. Vlcek J. and Pelican V. A collisional-radiative model applicable to argon discharges over a wide range of conditions. III: Application to atmospheric and subatmospheric pressure arcs.// J. Phys.D: Appl. Phys. 1990, v.23, p. 526 -532.
21. Александров В.Я., Гуревич Д.Б., Подмошенский И.В. Исследование механизма возбуждения и ионизации в плазме Ar дуги // Опт. и спектр.: 1967, т.23, вып.4, с.521-527.
22. Александров В.Я., Гуревич Д.Б., Подмошенский И.В. Измерение коэффициента рекомбинации α в плотной Ar плазме // Опт. и спектр.: 1968, т.24, вып.3, с.342-347.
23. Кули-заде М. Е. Моделирование компонентного состава в оптической диагностике плазменных потоков Ar, Xe, Y₂O₃, C₃₇H₄₇O₁₅ // Диссертация кандид. ф.-м.н. М.: МАИ, 2009
24. Колесников В.Н. Диагностика низкотемпературной плазмы. В энциклопедии низкотемпературной плазмы. Серия Б. 2006, с. 3-31.

Скороход Елена Пантелеймоновна, , профессор Московского авиационного института (национального исследовательского университета),д.т.н., тел. +7-909-966-57-57, e-mail: e.p.skorohod@mail.ru

Войницкий Станислав Олегович, студент Московского авиационного института (национального исследовательского университета), тел.+7-903-586-77-88, e-mail: svoynitskiy@gmail.com

