

Научная статья  
УДК 539.9, 539.17 — 539.19,  
УДК 539.51 — 74, 539.92, 621.039  
DOI: [10.34759/trd-2022-123-09](https://doi.org/10.34759/trd-2022-123-09)

## ПЛАЗМОМЕХАНИЧЕСКАЯ ТРАКТОВКА СОСТОЯНИЙ ВОЗБУЖДЁННЫХ АТОМОВ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ

Анна Юрьевна Гаврилова<sup>1</sup>, Марина Евгеньевна Кули-заде<sup>2</sup>,

Мария Владимировна Черкасова<sup>3</sup>✉

<sup>1,2,3</sup>Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)»,

<sup>1</sup>[gavrilovaann@mail.ru](mailto:gavrilovaann@mail.ru)

<sup>2</sup>[kuli\\_marina@mail.ru](mailto:kuli_marina@mail.ru)

<sup>3</sup>[maria-post@mail.ru](mailto:maria-post@mail.ru)✉

**Аннотация.** Плазмомеханическая трактовка возбуждённых атомов применяется в рамках физико-химической кинетики инертных газов. Рассматривается квазистационарная задача, когда общее число ядер известно. Вводится понятие вектор состояния как результат решения многоуровневой кинетики. Квазиравновесие низкотемпературной плазмы инертных газов характеризуется диаграммами параметров.

**Ключевые слова:** плазмомеханика, плазма инертных газов, столкновительно–излучательная модель, квазиравновесие, вектор состояния, диаграммы метаравновесных состояний

**Благодарности:** авторы статьи выражают огромную благодарность своему научному руководителю Скороход Елене Пантелеймоновне, профессору, доктору технических наук Московского авиационного института, за всестороннюю помощь и поддержку в работе.

**Для цитирования:** Гаврилова А.Ю., Кули-заде М.Е., Черкасова М.В. Плазмомеханическая трактовка состояний возбуждённых атомов инертных газов // Труды МАИ. 2022. № 123. DOI: [10.34759/trd-2022-123-09](https://doi.org/10.34759/trd-2022-123-09)

## PLASMOMECHANICAL INTERPRETATION OF EXCITED INERT GAS ATOMS STATES

**Anna Yu. Gavrilova<sup>1</sup>, Marina E. Kuli-zade<sup>2</sup>, Mariya V. Cherkasova<sup>3</sup>**✉

<sup>1,2,3</sup>Moscow Aviation Institute (National Research University),

Moscow, Russia

<sup>1</sup>[gavrilovaann@mail.ru](mailto:gavrilovaann@mail.ru)

<sup>2</sup>[kuli\\_marina@mail.ru](mailto:kuli_marina@mail.ru)

<sup>3</sup>[maria-post@mail.ru](mailto:maria-post@mail.ru)✉

**Abstract.** A plasma-mechanical approach to the problems of gas kinetics has been developed to improve passive optical diagnostic methods. The article considers the solution of quasi-stationary system of equations of radiation-collision model of inert gases low-temperature plasma depending on priority of electronic and photo-processes. The system of linear differential equations of kinetics is being reduced to a matrix form with a non-zero right part, which is being interpreted as an influence factor, for which a

relaxation matrix is being introduced. The obtained matrix equation is being solved by iterative methods for the selected final configuration of the inert gas atom levels (argon, xenon, krypton) using various models of influence factors.

If electronic processes are considered as an influence factor, then the calculated dependencies of electron concentration on the total number of nuclei correspond to the state of local thermodynamic equilibrium. Graphically, this dependence on a logarithmic scale is represented by straight lines. The populations of excited levels correspond to the Boltzmann distribution.

If photo-processes are being regarded as an influence factor, then, a deviation from the rectilinear dependence of the electron concentration on the total number of nuclei is being observed in the area of low and high electron concentrations. However, the populations of excited levels still correspond to the Boltzmann distribution.

The dissociative recombination processes addition to the “influence factor” in the case of two-temperature plasma, when the electron temperature is much higher than the temperature of heavy particles, fundamentally changes the character of the diagrams. The article presents diagrams of the metastable states of heavy inert gases, which include a non-traditional hysteresis region. Without accounting for the dissociative recombination, the curves of the metastable state diagram degenerate into a typical dependence.

The meta-equilibrium states diagram is useful for estimates in plasma spectroscopy, as well as for optical diagnostics of plasma flows.

**Keywords:** plasmomechanics, plasma of inert gases, the collisional–radiative model, dissociative recombination, a state vector, meta–equilibrium state diagram

**Acknowledgements:** the authors of the article express great gratitude to their scientific leader Skorokhod Elena Panteleimonovna, professor, doctor of technical sciences of the Moscow Aviation Institute, for comprehensive assistance and support in the work

*For citation:* Gavrilova A.Yu., Kuli-zade M.E, Cherkasova M.V. Plasmomechanical interpretation of excited inert gas atoms states. *Trudy MAI*, 2022, no. 123. DOI: [10.34759/trd-2022-123-09](https://doi.org/10.34759/trd-2022-123-09)

## Введение

Изучение механики плазмы необходимо для решения задач, относящихся к высокотемпературной газодинамике, а также радиационной плазмодинамике [1, 2]. В настоящее время в связи с многочисленными работами в технических отраслях [3–6] и созданием обеспечивающих их программных продуктов [7–11], а также в целях развития методов пассивной оптической диагностики [12–14] появилась потребность в развитии плазмомеханического подхода в газовой кинетике [15]. Поскольку плазма инертных газов широко используется в различных областях техники (плазменная обработка поверхностей, различные типы электроракетных двигателей и т.д), в данной работе рассматривается применение плазмомеханического подхода на примере инертных газов (аргон, ксенон, криптон).

Как правило, в физико-химической кинетике рассматриваются временные задачи, поскольку для них разработаны алгоритмы (методы балансировки, Хессенберга, QR–метод и др.). Однако, в оптической диагностике низкотемпературной плазмы полезно рассмотрение квазистационарных задач. В

этом контексте следует заметить, что в исследованиях по созданию управляемого термоядерного синтеза (УТС) также уделялось серьезное внимание вопросам квазиравновесия высокотемпературной плазмы [16-19].

Впервые толкование квазистационарности как квазиравновесия при рассмотрении многоуровневой столкновительно-излучательной модели, в которой учитывались взаимодействия атомов с электронами и радиационные процессы, было применено К.Л. Степановым [20, 21]. Им построена система уравнений вида:

$$\sum_{n=1}^{m'} W_{nm}^{(i)} X_m^{(i)} + D_m^{(i)} = 0,$$

где  $W_{nm}^{(i)}$  – матрица, учитывающая все возможные переходы между дискретными уровнями атома, а также уход в континуум (ионизация атома или ионов кратностей  $i$ ). Член  $D_m^{(i)}$  даёт поток частиц на  $m$ – уровень  $i$ – кратности за счёт ионизации и рекомбинации ионов других кратностей  $i \pm 1$ .

Важно отметить, что Степанов К.Л. [20], рассматривая стационарную задачу, утверждает, что “решение квазистационарной системы уравнений радиационно–столкновительной модели описывает состояние ударно-излучательного **равновесия** в широком диапазоне условий, включающем области коронального и термодинамического равновесия” в зависимости от приоритета электронных и фото-процессов.

Для развития плазмомеханического подхода [20] в целом представляется полезным анализ, проведённый А.Г. Киселёвым [22].

# 1. Система кинетических уравнений и релаксационная матрица

## для электрон–атомных столкновений

### 1.1 Плазмохимические реакции

Для электрон–атомных взаимодействий в результате столкновений электронным ударом [23, 24] рассматриваются реакции:

– взаимодействие с электронами, учитывающее возбуждение и снятие возбуждения электронным ударом в кинетических уравнениях в виде элемента матрицы  $Z_{ij}$



– ионизация электронным ударом,  $ZO_i$



– тройная рекомбинация,  $T_i$



где  $X_i$  – концентрации атомов в возбужденных состояниях с энергиями возбуждения  $E_i$ ,  $X_j$  – концентрация атомов в состоянии с энергией возбуждения  $E_j$ . Совокупность всех  $X_i$  образует так называемый вектор состояний  $\vec{X}$ . Символ  $i$  соответствует либо уровню в выбранной схеме уровней, начиная с основного  $X_1$ , либо группе уровней. В этих реакциях также участвуют электроны "e" с концентрацией  $N_e$  и первые ионы в основном состоянии, концентрации которых обозначены  $X_+$ .

Для каждой из компонент, участвующих в реакциях (1)–(3), составляются уравнения. Так для электронов записывается уравнение Больцмана и

рассматривается функция распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ), подчиняющаяся этому уравнению [25]. Для концентраций других компонент записываются уравнения кинетики. Поскольку слагаемые матрицы  $Z_{ij}$  обусловлены свёрткой сечения электронным ударом с ФРЭЭ [23, 25], такая задача решается поэтапно итерационными методами.

Система кинетических уравнений [23, 24], определяющих баланс частиц в каждом  $i$ -ом состоянии атома (иона) в соответствие с выбранной схемой уровней (конфигураций), в подробном представлении обычно записывается в виде:

$$\begin{cases} \frac{dX_i}{dt} = -X_i \cdot N_e (\sum_{k>i} Z_{ik}^I + \sum_{m<i} Z_{im}^{II} + Z_{0i}) + \sum_{m<i} Z_{mi}^I N_e X_m + \sum_{k>i} Z_{ki}^{II} N_e X_k + T_i N_e^2 X_+, \\ \frac{dX_+}{dt} = N_e \sum_i X_i \cdot Z_{0i} - N_e X_+ (N_e \sum_i T_i) \end{cases} \quad (4)$$

где  $Z_{ik}^I, Z_{im}^{II}$  - скорости ударов I и II рода при столкновении электрона с атомом (как свертка сечений с ФРЭЭ),  $Z_{0i}, T_i$  - скорости ионизации электронным ударом и тройной рекомбинации соответственно. Для тяжелых инертных газов схемы уровней и константы скоростей процессов приведены в [24].

Поскольку число уравнений в рассматриваемой системе является конечным, то выбирается конкретная схема уровней (групп уровней) атома и к ним добавляется  $(n+1)$ -уравнение для ионов.

## 1.2 Матричное представление системы

Рассмотрим состояние иона как “последнее” возможное возбужденное состояние атома, тогда концентрацию ионов  $X_+$  можно включить в состав вектора

состояния в качестве последнего элемента. Таким образом, систему (4) можно переписать в симметричном виде:

$$\frac{dX_i}{dt} = -X_i \sum_k W_{ik} + \sum_k X_k W_{ki} \quad (5)$$

где индекс будет принимать значения  $i=1,2,\dots,n,+$ , то есть значение “ $i=+$ ” соответствует обозначению иона. Первая сумма в выражении (5) определяет убыль частиц из состояния  $i$ , вторая сумма прибыль частиц на этом уровне при переходе со всех уровней  $k$ . Элементы матрицы  $W_{ik} = N_e Z_{ik}$  имеют размерность  $\text{с}^{-1}$ , выражают скорость изменения концентраций при переходе атома из нижнего состояния  $i$  в верхнее состояние  $k$  и представлены в Таблице 1.

Для численного моделирования кинетических уравнений, по возможности, выбирается конечное число примерно равноотстоящих подуровней энергии для расчета скоростей переходов. Поскольку расположение энергетических уровней инертных газов имеет сходный характер, моделирование проведено для аргона, ксенона и криптона. Согласно схеме возможной группировки уровней, рассмотренной в [24], для примера применения метода выбрана схема из 38 уровней. Заметим, что справедливы равенства:  $W_{ii} = 0$ ,  $W_{i+} = N_e Z_{0i}$ ,  $W_{+i} = N_e^2 T_i$ . Если просуммировать все уравнения (5) с целью учёта убыли и прибыли компонент по состояниям

$$\frac{d}{dt} \sum_i X_i = \sum_{ik} (X_k W_{ki} - X_i W_{ik}) = 0 \quad (5a)$$



получим ноль. Это означает, что общее число частиц (ядер)  $NO$  не изменяется, атомы могут находиться в любом состоянии, но закон сохранения массы выполняется, то есть:

$$\sum X_i = NO = const \quad (6)$$

Как правило, полное число частиц (ядер)  $NO$  известно, поэтому число ионов есть:

$$X_+ = NO - \sum_k X_k \quad (7)$$

Суммирование со штрихом ведется по возбужденным состояниям атома ( $i = 1, 2, 3, \dots, n$ ).

Таблица 1.

**Элементы матрицы скоростей переходов  $W$**

	1	2	3	...	$i$	...	38	+
1	0	$N_e \cdot Z_{12}^I$	$N_e \cdot Z_{13}^I$	...	$N_e \cdot Z_{1i}^I$	...	$N_e \cdot Z_{1,38}^I$	$N_e^2 \cdot Z0_1$
2	$N_e \cdot Z_{21}^{II}$	0	$N_e \cdot Z_{23}^I$	...	$N_e \cdot Z_{2i}^I$	...	$N_e \cdot Z_{2,38}^I$	$N_e^2 \cdot Z0_2$
3	$N_e \cdot Z_{31}^{II}$	$N_e \cdot Z_{32}^{II}$	0	...	$N_e \cdot Z_{3i}^I$	...	$N_e \cdot Z_{3,38}^I$	$N_e^2 \cdot Z0_3$
...	...	...	...	...	...	...	...	...
$I$	$N_e \cdot Z_{i1}^{II}$	$N_e \cdot Z_{i2}^I$	$N_e \cdot Z_{i3}^I$	...	0	...	$N_e \cdot Z_{i,38}^{II}$	$N_e^2 \cdot Z0_i$
...	...	...	...	...	...	...	...	...
38	$N_e \cdot Z_{38,1}^I$	$N_e \cdot Z_{38,2}^I$	$N_e \cdot Z_{38,3}^I$	...	$N_e \cdot Z_{38,i}^I$	...	0	$N_e^2 \cdot Z0_{38}$
+	$N_e^2 T_1$	$N_e^2 T_2$	$N_e^2 T_3$	...	$N_e^2 T_i$	...	$N_e^2 T_{38}$	0

По условию задачи для заряженных частиц выполняется закон сохранения заряда

$$X_+ = N_e \quad (8)$$

### 1.3 Переход к векторной форме

Формализм кинетики не учитывает, как в действительности получена та или иная плазма. В практических приложениях, использующих теорию линейных дифференциальных уравнений, для системы уравнений вида  $\frac{d\vec{X}}{dt} + \hat{V}\vec{X} = \vec{\gamma}$ , вектор  $\vec{\gamma}$  в правой части рассматривается как “нормальная реакция на внешнюю нагрузку” [26]. В нашем случае назовем правую часть  $\vec{\gamma}$  “фактором влияния” и поймем его суть. С этой целью рассмотрим систему (4), сохранив нумерацию  $i = 1, 2, \dots, n$ , а суммирование обозначим как  $\Sigma'$

$$\frac{dX_i}{dt} = -X_i \sum_{k,+} W_{ik} + \sum_k' X_k W_{ki} + X_+ W_{+i} \quad (9)$$

$$\frac{dX_+}{dt} = -X_+ \sum_k' W_{+k} + \sum_k' X_k W_{k+} \quad (9a)$$

В последнем уравнении (9a) обе суммы со штрихами, так как  $X_+ W_{++} = 0$ .

Общее число ядер известно, задается формулой (7) и не изменяется, поэтому уравнение (9a) можно исключить. Действительно, продифференцируем (7):

$$\frac{d}{dt} X_+ = -\sum_k' \frac{dX_k}{dt} = -X_+ \sum_k' W_{+k} + \sum_k' X_k W_{k+}$$

Выражение  $-\sum_k' \frac{dX_k}{dt}$  в левой части есть не что иное, как (5a), которое равно нулю, поэтому равна нулю и правая часть в вышеуказанном выражении. Таким образом, (9a) можно исключить и рассматривать только уравнение (9).

Для того чтобы понять, какой именно фактор оказывает наибольшее влияние на наше решение (вектор состояния  $\vec{X}$ ) и тем самым обозначить источник влияния,

перепишем уравнение (9), оставив член пропорциональный  $X_+$  в правой части и заменив его на  $N_e = X_+$

$$\frac{dX_i}{dt} + X_i \sum_k W_{ik} - \sum_k W_{ki} X_k = X_+ W_{+i} = N_e W_{+i} \quad (10)$$

Тем самым как бы подчеркивается особое место ионной компоненты по сравнению с просто возбужденными состояниями. Как отмечено в [22], система (10) формально

приведена к виду  $\frac{d\vec{X}}{dt} + \hat{V}\vec{X} = \vec{\gamma}$ , когда присутствует правая часть – “нормальная реакция на внешнюю нагрузку”, названная нами “фактором влияния”.

В связи с этим рассмотрим задачу в следующей постановке: если степень ионизации не превышает единицу, то источником влияния на все состояния являются ионы  $X_+$ . Для этого введем новую матрицу  $\hat{V}$  (Таблица 2), элементы которой представлены в виде

$$V_{ij} = \delta_{ij} \left[ \sum_m (W^T)_{mi} + W_{i+} \right] - (W^T)_{ij} = \delta_{ij} \left[ \sum_k W_{ik} + W_{i+} \right] - W_{ji} \quad (11)$$

где индексы  $i, j = 1, 2, \dots, n$ ;  $\delta_{ij}$  - символ Кронекера,  $\hat{W}^T$  - транспонированная матрица, которая содержит скорости возбуждения электронным ударом для связанно-связанных переходов. Фактор влияния  $\vec{\gamma}$  примет новый вид

$$\vec{\gamma} = N_e^3 \vec{T}, \quad \text{где } \gamma_i = N_e^3 T_i. \quad (12)$$

Диагональные элементы матрицы  $V_{ij}$  (11) равны сумме элементов столбца матрицы  $(W^T)$  и скорости ионизации  $i$ -го состояния –  $W_{i+}$ .

Введем специальные матричные обозначения. Некоторый вектор (например, тройной рекомбинации  $\vec{T}$ ) может быть представлен матрицей  $\hat{T}$  с применением единичной матрицы  $\hat{E}$ :

$$\hat{T} = \hat{E} \cdot \vec{T} \quad (13)$$

то есть диагональные элементы такой матрицы равны соответствующим компонентам вектора  $\vec{T}$ .

Скалярная величина  $T$  принимается равной сумме всех компонент вектора  $\vec{T}$

$$T = \sum_i T_i \quad (13a)$$

Матрицу с элементами вида  $M_{ij} = a_i b_j$  будем обозначать:

$$\hat{M} = \vec{a} \otimes \vec{b} \quad (14)$$

Далее будет также использоваться матрица, образованная из двух векторов  $\vec{a}$  и  $\vec{b}$

$$\hat{M} = \vec{a} - \vec{b} \otimes \vec{a} \quad (15)$$

Для такой матрицы сумма ее строк равна нулю, если выполняется

Таблица 2.

Релаксационная матрица  $\hat{V}$

	1	2	3	...	$i$	...	38
1	$N_e^2 \cdot Z_{01} + \sum_k N_e Z'_{1k}$	$-N_e \cdot Z''_{21}$	$-N_e \cdot Z''_{31}$	...	$-N_e \cdot Z''_{i1}$	...	$-N_e \cdot Z''_{38,1}$
2	$-N_e \cdot Z^I_{12}$	$N_e^2 \cdot Z_{02} + N_e \cdot Z''_{21} + \sum_k N_e Z'_{2k}$	$-N_e \cdot Z''_{32}$	...	$-N_e \cdot Z''_{i2}$	...	$-N_e \cdot Z''_{38,2}$

3	$-N_e \cdot Z_{13}^I$	$-N_e \cdot Z_{23}^I$	$N_e^2 \cdot Z_{03} +$ $+\sum_{k<3} N_e Z_{3k}^{II} +$ $+\sum_{k>3} N_e Z_{3k}^I$	...	$-N_e \cdot Z_{i3}^{II}$	...	$-N_e \cdot Z_{38,3}^{II}$
...	...	...	...	...	...	...	...
$i$	$-N_e \cdot Z_{1i}^I$	$-N_e \cdot Z_{2i}^I$	$-N_e \cdot Z_{3i}^I$	...	$N_e^2 \cdot Z_{0i} +$ $+\sum_{k<i} N_e Z_{ik}^{II} +$ $+\sum_{k>i} N_e Z_{ik}^I$	...	$-N_e \cdot Z_{38,i}^{II}$
...	...	...	...	...	...	...	...
38	$-N_e \cdot Z_{1,38}^I$	$-N_e \cdot Z_{2,38}^I$	$-N_e \cdot Z_{3,38}^I$	...	$-N_e \cdot Z_{i,38}^I$	...	$N_e^2 \cdot Z_{0,38} +$ $+\sum_{k<38} N_e Z_{38,k}^{II}$

$$b = \sum_i b_i = 1 \quad (16)$$

$$\sum_i M_{ij} = \left(1 - \sum_i b_i\right) a_j = (1 - b) a_j = 0 \quad (17)$$

Перепишем систему (10) в новых обозначениях, опуская штрихи при суммировании ( $i, j = 1, 2, \dots, n$ ):

$$\frac{dX_i}{dt} + \sum_{j=1}^n V_{ij} X_j = N_e W_{+i} \quad \text{и} \quad (\gamma_i = N_e W_{+i}) \quad (18)$$

Таким образом, получена требуемая форма уравнения типа

$$\frac{d\vec{X}}{dt} + \hat{V} \vec{X} = \vec{\gamma} \quad (19)$$

с векторной правой частью – “фактором влияния”, компоненты которого обусловлены тройной рекомбинацией на электронах. Релаксационная матрица  $\hat{V}$  характеризует свойства (19).

#### 1.4 Квазиравновесие

Согласно [20, 21] будем рассматривать квазиравновесие как квазистационарную задачу для кинетической системы уравнений (4) для чего отбросим одно “лишнее” уравнение, так как известно полное число частиц, и после преобразований обнулим производные по времени. С учетом новых обозначений (11) и (12) исключим ион  $X_+$  из исходной системы (4) где матрица  $\hat{V}$  является суммой матрицы  $\hat{V}^e$ , элементы которой образуются из недиагональных элементов, и диагонали, включающей ионизацию и тройную рекомбинацию:

$$\begin{cases} \frac{d\vec{X}}{dt} + \hat{V}^e \cdot \vec{X} = -N_e(\hat{Z}0 \cdot \vec{X}) + N_e \cdot X_+ (N_e \cdot \vec{T}), \\ \frac{dX_+}{dt} = N_e(\vec{Z}0 \cdot \vec{X}) - N_e \cdot X_+ (N_e \cdot T) \end{cases} \quad (20)$$

Сложим два уравнения системы (20), умножив первое на  $T$ , а второе – на  $\vec{T}$ :

$$T \cdot \frac{d\vec{X}}{dt} + \vec{T} \cdot \frac{dX_+}{dt} + T \cdot \hat{V}^e \cdot \vec{X} = -T \cdot N_e(\hat{Z}0 \cdot \vec{X}) + \vec{T} \cdot N_e(\vec{Z}0 \cdot \vec{X}) \quad (20a)$$

Обозначив  $\vec{\gamma} = \vec{T}/T$ , в отличие от (12), получаем уравнение

$$\frac{d\vec{X}}{dt} + \vec{\gamma} \cdot \frac{dX_+}{dt} + \hat{V}^e \cdot \vec{X} = -N_e(\hat{Z}0 \cdot \vec{X}) + \vec{\gamma} \cdot N_e(\vec{Z}0 \cdot \vec{X}) \quad (21)$$

Релаксационная матрица  $\hat{V}^e$  учитывает “электронное перемешивание”,  $Z$  – процессы и не включает диагональные элементы. Квазистационарное уравнение (21) с учетом матричной записи

$$\hat{V}_{\text{пол}} = \hat{V}^e + N_e(\hat{Z}0 - \vec{\gamma} \otimes \vec{Z}0) \quad (22)$$

(см. таблица 2) описывает квазиравновесие, при условии

$$\hat{V}_{\text{пол}} \cdot \vec{X} = 0 \quad (23)$$

Уместно напомнить о несимметричной спектральной задаче, см. например [3, 8, 9, 28, 29], уточнив правую часть уравнения (23)

$$\hat{V}_{\text{пол}} \cdot \vec{X} = \vec{\lambda} \otimes \vec{X} \quad (23a)$$

Согласно схеме сгруппированных уровней, рассмотренной в [24], выполнен модельный расчет для 38 уровней. Графически решение уравнения (23) представлено на диаграмме параметров Ar, Kr, Xe (рисунок 1) в виде зависимости концентрации электронов  $N_e$  от полного числа ядер  $NO$  в логарифмическом масштабе. Диагональная линия на рисунках представляет предел ионизации (число электронов равно числу ядер). При повышении температуры электронов явление двукратной ионизации не учитывается. Полученное решение задачи многоуровневой кинетики с участием электронов (1) – (3) (столкновительная модель), представленное на рисунке 1 прямыми линиями, соответствует локальному термодинамическому равновесию (ЛТР) [23, 27] и подтверждает адекватность выбранной модели квазиравновесия и метода решения. Распределение возбужденных состояний (рисунок 2) также представлено прямой линией, что соответствует распределению Больцмана для концентраций в модели ЛТР. Значение концентрации атомов  $X_1$ , полученное по формуле Саха [27], при заданной концентрации электронов  $N_e$  и температуре электронов  $T_e$  совпадает с полученным решением многоуровневой кинетики. Таким образом, проверка разработанной матричной методики решения на столкновительной модели атом-электронных взаимодействий показала соответствие равновесным распределениям параметров.

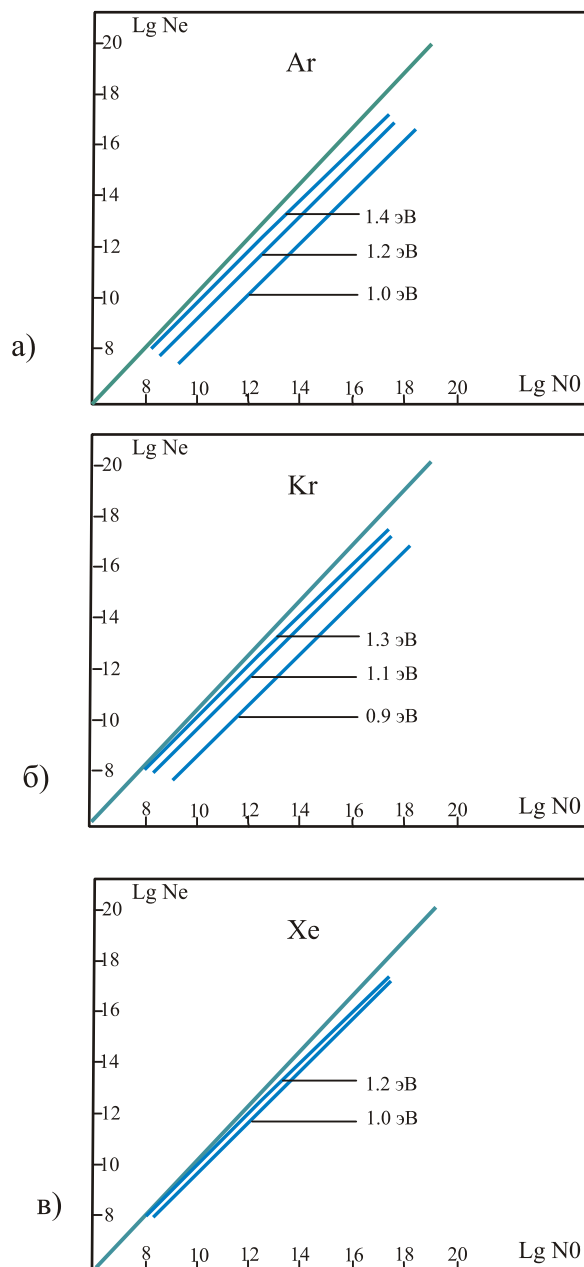


Рисунок 1. Зависимости концентрации электронов от концентрации ядер по модели электрон–атомных столкновений (1) – (3) .

Полученные зависимости позволяют по экспериментально определенным концентрациям электронов или ионов находить концентрацию ядер и температуру электронов.



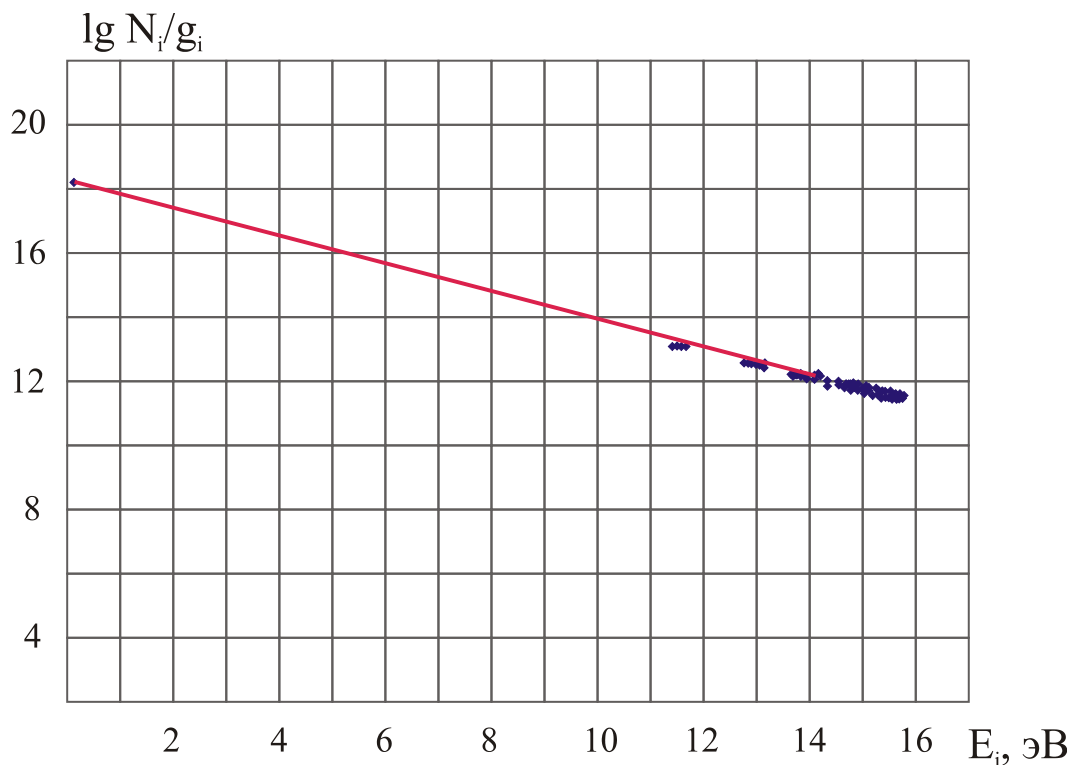


Рисунок 2. Распределение возбужденных состояний аргона с учётом электрон – атомных столкновений (1) – (3),

$g_i$  – статистический вес состояния,  $E_i$  – энергия возбужденного состояния.

$$T_e=1.1 \text{ эВ}, N_e=10^{17}\text{см}^{-3}, NO =1.58 \cdot 10^{18}\text{см}^{-3}.$$

## 2. Кинетика радиационных процессов

Частично ионизованные газы почти всегда прозрачны во многих частотных диапазонах. Излучение уходит из объема плазмы, нарушая термодинамическое равновесие. Значение радиационных процессов возрастает по мере уменьшения плотности плазмы и снижения частоты столкновительных процессов [24]. Рассматриваются следующие реакции, возникающие под действием фотонов с энергией  $\hbar\omega$ :

- спонтанный переход из состояния  $i$  в состояние  $j$  с испусканием фотона



характеризуется коэффициентом Эйнштейна  $A_{ij}$ , то есть вероятностью перехода;

- фотоионизация

$$X_i + \hbar\omega \rightarrow X_+ + e; \quad (25)$$

характеризуется константой скорости фотоионизации  $F0_i$ ;

- фоторекомбинация в состояние  $j$

$$X_+ + e \rightarrow X_j + \hbar\omega; \quad (26)$$

характеризуется константой скорости фоторекомбинации  $F_j$ .

Рассмотрим электрон–фотонную матрицу  $\hat{W}^{ev}$  [20, 21], которая является суммой двух матриц. Первая матрица  $\hat{Z}$  рассмотрена в разделе 1 и учитывает столкновения с электронами. Вторая матрица  $\hat{A}$  учитывает скорости фотопроцессов.

$$\hat{W}^{ev} = N_e \hat{Z} + \hat{A} \quad (27)$$

Скорости электронных переходов  $N_e \cdot \hat{Z}$  усредняются по заданной ФРЭЭ [23, 25]

$Z_{ik} = \langle \sigma_{ik} \nu \rangle$ , где  $\sigma_{ik}$  – соответствующее сечение столкновений,  $\nu$  – скорость электрона.

Введем новую релаксационную матрицу:

$$V_{ij}^{ev} = \delta_{ij} \left[ \sum_k (W^{evT})_{ki} + W_{i+} \right] - (W^{evT})_{ij} \quad (28)$$

аналогично формуле (11), но с учетом фотопроцессов. Также с учетом фотопроцессов (24) – (26) в правых частях уравнений (20) появятся новые слагаемые:

$$- \text{для возбужденных состояний атома} \quad - (FO \cdot \vec{X})_+ + N_e X_+ \vec{F} \quad (29)$$

$$- \text{ для состояний иона} \quad + \left( \vec{FO} \cdot \vec{X} \right) - N_e X_+ F \quad (30)$$

Таким образом, изменился вид релаксационной матрицы и вид “фактора влияния” (правая часть системы). Система (20) с учетом фотопроцессов принимает вид:

$$\begin{cases} \frac{d\vec{X}}{dt} + \hat{V}^{ev} \cdot \vec{X} = -N_e (\hat{Z}0 \cdot \vec{X}) + N_e \cdot X_+ (N_e \cdot \vec{T}) - (FO \cdot \vec{X}) + N_e X_+ \vec{F}, \\ \frac{dX_+}{dt} = N_e (\vec{Z}0 \cdot \vec{X}) - N_e \cdot X_+ (N_e \cdot T) + \left( \vec{FO} \cdot \vec{X} \right) - N_e X_+ F \end{cases} \quad (31)$$

где  $T = \sum_i T_i$ ,  $F = \sum F_i$ .

Как и прежде выполняется закон сохранения заряда:  $\frac{d}{dt}(X^+ - N_e) = 0$ .

Как уже отмечалось, поскольку число ядер не изменяется, система (31) является переопределенной. Повторим процедуру, использованную в п. 1.5: исключим из системы (31) последнее уравнение. Для этого введем новый фактор влияния  $\vec{\gamma}$  с учетом фоторекомбинации:

$$\vec{\gamma} = \frac{\vec{F} + N_e \vec{T}}{F + N_e T}. \quad (32)$$

При этом сумма всех компонент  $\vec{\gamma}$  по-прежнему равна  $\gamma = \sum \gamma_i = 1$ . Тогда система (31) преобразуется к матричному уравнению (аналог уравнения (21)):

$$\left( \vec{\gamma} \frac{dX^+}{dt} + \frac{d\vec{X}}{dt} \right) + \left[ \hat{V}^{ev} + N_e \left( \hat{Z}0 - \vec{\gamma} \otimes \vec{Z}0 \right) + \left( \hat{F}0 - \vec{\gamma} \otimes \vec{F}0 \right) \right] \vec{X} = 0 \quad (33)$$

В матричной записи условие квазиравновесия для уравнения (33), имеет вид:

$$\hat{V}_{\text{пол}} \cdot \vec{X} = 0 \quad (34)$$

где

$$\hat{V}_{\text{пол}} = \hat{V}^{ev} + N_e \left( \hat{Z}O - \vec{\gamma} \otimes \vec{Z}O \right) + \left( \hat{F}O - \vec{\gamma} \otimes \vec{F}O \right) \quad (35)$$

Уравнение (34), с учетом матрицы  $\hat{V}_{\text{пол}}$  излучательно–столкновительных процессов, соответствует решению задачи о квазиравновесии, предложенному К.Л. Степановым [20].

Результат решения уравнения (34) с матрицей (35) представлен на рис. 3. В отличие от рис. 1, соответствующего случаю рассмотрения только электронных процессов, при температуре  $T_e=0.8$  эВ зависимость отклоняется от прямолинейной и имеет две асимптоты (штриховые линии на рисунке) при малых концентрациях электронов (корональная модель) и при больших концентрациях электронов (модель ЛТР).

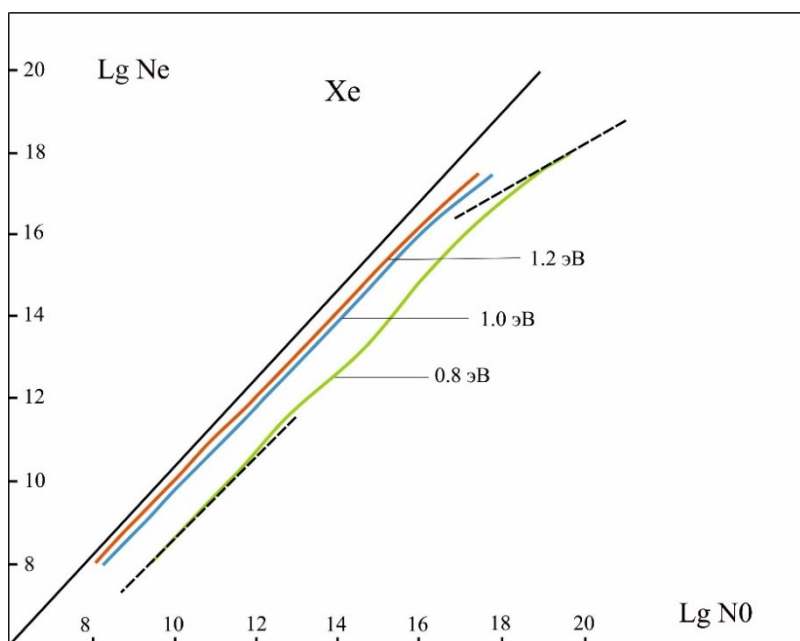


Рисунок 3. Диаграммы зависимости концентрации электронов от концентрации ядер для ксенона Xe с учетом фото процессов.

Заселенности возбужденных состояний по-прежнему подчиняются распределению Больцмана. На рис. 4 приведен пример заселенностей энергетических уровней для

ксенона. Задаваемая в расчете температура совпала с температурой, получаемой по наклону кривых на диаграмме по результатам моделирования (чем круче наклон линии, тем ниже температура).

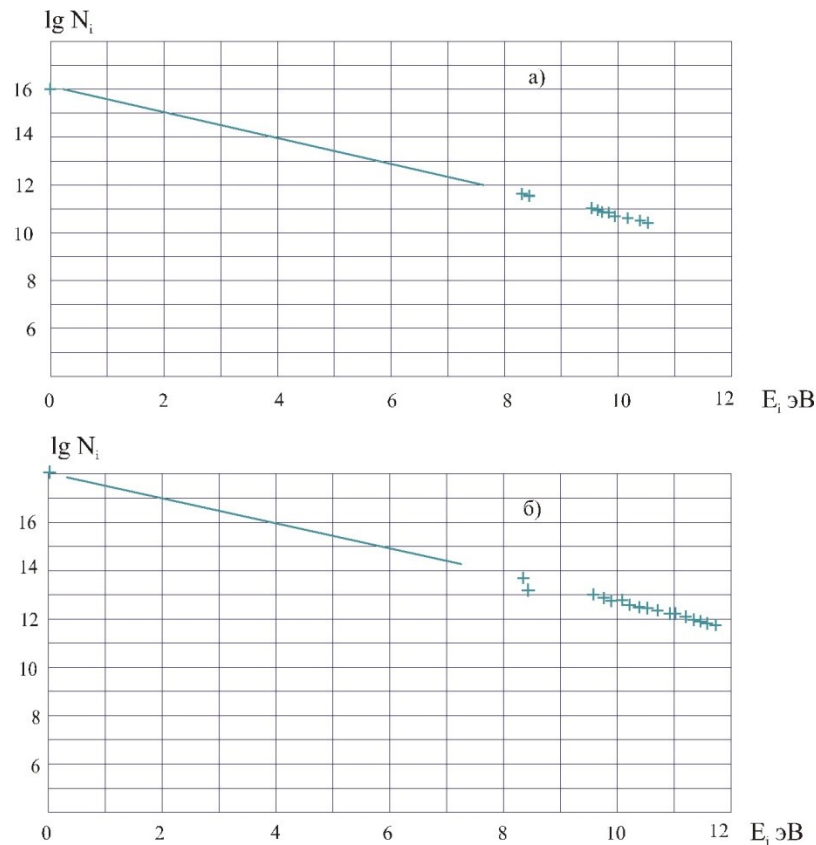


Рисунок 4. Распределение заселенностей возбужденных состояний ксенона Хе с учетом фотопроцессов.

- а) оптически тонкая плазма ксенона  $T_e=0.8$  эВ,  $N_e=10^{16}$  см<sup>-3</sup>,  $NO=1.32 \cdot 10^{17}$  см<sup>-3</sup>;
- б) оптически плотная плазма ксенона  $T_e=0.8$  эВ,  $N_e=10^{17}$  см<sup>-3</sup>,  $NO=2.04 \cdot 10^{18}$  см<sup>-3</sup>.

### 3. Кинетика диссоциативной рекомбинации

Отклонение от термодинамического равновесия также может быть вызвано неизотермичностью плазмы, когда температура электронов отличается от температуры тяжелых частиц. В этом случае диссоциативная рекомбинация,

рассмотренная как “фактор влияния” приводит к существенному изменению характера зависимости концентрации электронов от концентрации ядер.

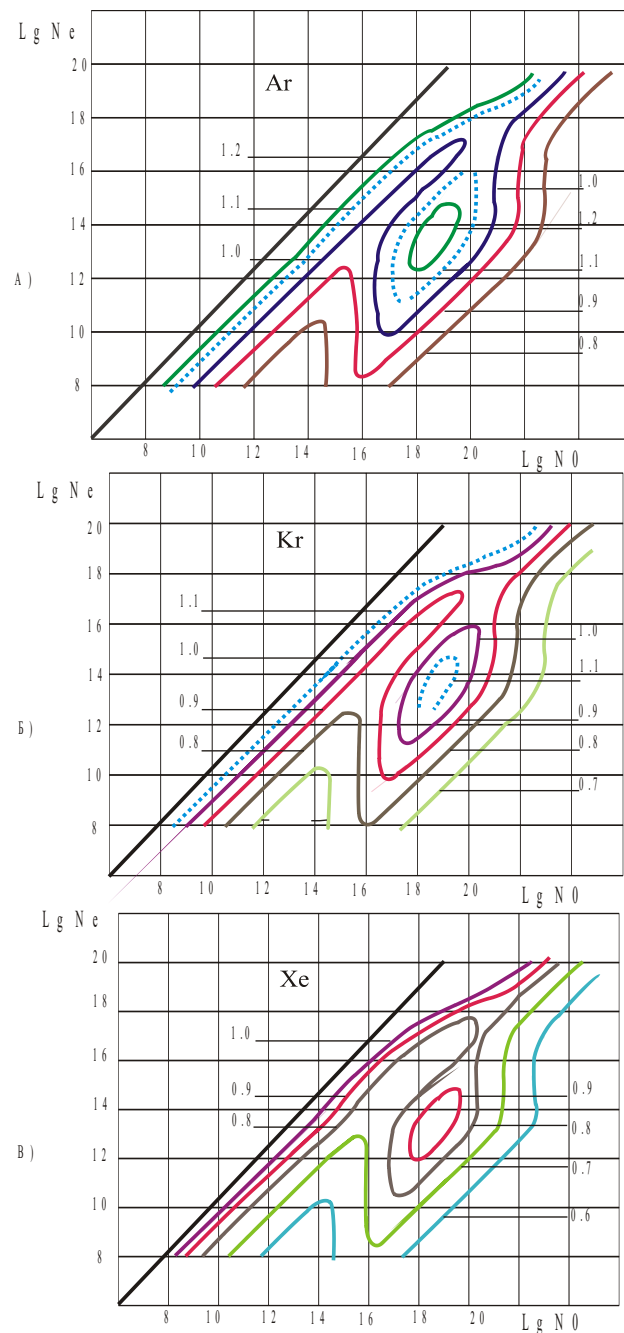


Рисунок 5. Диаграммы метаравновесных состояний оптически тонкой плазмы аргона Ar, криптона Kr и ксенона Xe.

В этом случае диаграмма параметров, рассмотренная в п.1. и п.2, преобразуется в диаграмму метаравновесных состояний (рис. 5), которая имеет нетрадиционную

область гистерезисного характера. Наличие таких областей свидетельствует о том, что при одинаковой температуре электронов и одинаковом количестве ядер могут, тем не менее, реализовываться разные по степени ионизации состояния плазменной системы.

Диаграмма метаравновесных состояний полезна для оценок в спектроскопии плазмы, а также для оптической диагностики плазменных потоков.

### **Заключение**

Изучение разных видов кинетических уравнений баланса состояний, разбивка по группам уровней и учёт разных типов реакций является важным этапом развития плазмомеханики как для инертных газов, так и в более общем случае.

Рассмотрено получение матричного вида системы кинетических уравнений, в которых состояние иона трактуется как одно из возможных возбужденных состояний атома, что позволило привести систему к симметричному виду. Выполнен расчет модельной схемы уровней и проверена его адекватность модели ЛТР.

Разработанная матричная запись кинетических уравнений делает возможным применить единый алгоритм решения квазистационарной задачи в широком диапазоне параметров (с учетом фотопроцессов и без них, с учетом диссоциативной рекомбинации). Предлагаемый способ решения задачи плазмомеханики позволяет уточнять константы скоростей процессов, рассматривать реакции с ионами разной кратности и молекулами.

Показано, что учёт диссоциативной рекомбинации для двухтемпературной плазмы, принципиально меняет характер диаграмм параметров и свидетельствует о вариативности состояний плазмы, поскольку имеет области гистерезисного типа. Приведены диаграммы рассчитанных зависимостей числа электронов от числа ядер для метаравновесных состояний тяжёлых инертных газов (Ar, Kr, Xe) в сравнении с типичными диаграммами квазиравновесных состояний.

Рассчитываемые диаграммы параметров будут полезны при анализе результатов спектроскопических исследований плазменных потоков в установках плазменного напыления, а также при анализе характеристик плазменных двигателей.

### **Список источников**

1. Лосев С.А., Сергиевская А.Л. Каталог моделей физико–химических процессов: наполнение интернет – реализации // Материалы VII Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (Алушта, 24-31 мая 2008). – М.: Изд-во МАИ, 2008. С. 286–288.
2. IX Международный симпозиум по радиационной плазмодинамике: сборник научных трудов (Звенигород, 2012). – М.: Изд-во НИЦ «Инженер», 2012. –283 с.
3. Крюков В.Г. Исхакова Р.Л., Дуригон А. Эволюция собственных значений уравнений химической кинетики для газофазной реагирующей среды // Материалы VI Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (Санкт-Петербург, 26 июня -1 июля 2006). – М.: Вузовская книга, 2006. С. 220 – 222.



4. Абдуллин А.Л., Крюков В.Г., Березовская К.А. Применение собственных значений в задачах расчета процессов горения // Материалы XI Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (Алушта, 25-31 мая 2016). – М.: Изд-во МАИ, 2016. С. 116-118.
5. Крюков В.Г., Абдуллин А.Л., Демин А.В., Сафиуллин И.И. Сравнение явных и неявных разностных схем расчета химически неравновесных процессов в соплах // Труды МАИ. 2017. № 92. URL: <http://trudymai.ru/published.php?ID=76848>
6. Чебакова В.Ю. Моделирование высокочастотного емкостного разряда при атмосферном давлении в аргоне // Ученые записки Казанского университета. Серия: Физико-математические науки. 2016. Т. 158. № 3. С. 404-423.
7. Полак Л.С., Гольденберг М.Я., Левицкий А.А. Вычислительные методы в химической кинетике. – М.: Наука, 1984. – 280 с.
8. Пирумов У.Г., Росляков Г.С. Численные методы газовой динамики. – М.: Высшая школа, 1987. – 232 с.
9. Коллатц Л. Задачи на собственные значения (с техническими приложениями). – М.: Наука, 1968. – 501 с.
10. Черный Г.Г., Лосев С.А. (ред). Физико-химические процессы в газовой динамике: справочник. Т.І. - М.: Изд-во Московского университета, 1995. - 343 с.
11. Черный Г.Г., Лосев С.А. (ред). Физико-химические процессы в газовой динамике: справочник. Т.ІІ. - М.: Научно-издательский центр механики, 2002. - 368 с.

12. Hyun-Kyung Chung, Mi-Young Song, Ji-Won Kwon et al. Population Kinetics Modeling of Low-Temperature Argon Plasma // *Atoms*, 2021, vol. 9, no. 4, pp. 100. URL: <https://doi.org/10.3390/atoms9040100>
13. Kil-Byoung Chai, Duck-Hee Kwon. Optical emission spectroscopy and collisional-radiative modeling for non-equilibrium, low temperature helium plasma // *Spectrochimica Acta Part B Atomic Spectroscopy*, 2021, vol. 183, pp. 106269. DOI:[10.1016/j.sab.2021.106269](https://doi.org/10.1016/j.sab.2021.106269)
14. Криворучко Д.Д., Скрылев А.В., Скороход Е.П. Определение концентраций возбужденных состояний и вероятностей радиационных переходов ХеI плазмы Холловских двигателей // *Труды МАИ*. 2017. № 92. URL: <http://trudymai.ru/published.php?ID=76859>
15. Гаврилова А.Ю., Киселёв А.Г., Скороход Е.П. Диаграммы метаравновесных состояний тяжёлых инертных газов // *Теплофизика высоких температур*. 2014. Т. 52. № 2. С. 174–185.
16. Морозов А.И. Введение в плазмодинамику. – М.: Физматлит, 2008. – 616 с.
17. Чмыхова Н.А. Математические модели формирования равновесных конфигураций плазмы в магнитных ловушках – галатях. Дисс. канд. ф-м. наук. – М.: Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, 2015. – 127 с.
18. Чирков А.Ю. Модель двухжидкостного квазиравновесия плазмы с течениями // *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Серия: Естественные науки*. 2006. № 2. С. 115-124.

19. Гордеев А.В. Неквазинейтральные токовые квазиравновесия как элементарные структуры плазменной динамики // Физика плазмы. 2010. Т. 36. № 1. С. 33-52.
20. Романов Г.С., Степанов К.Л., Станчиц Л.К. Теплофизические свойства и спектральные параметры излучения многозарядной неравновесной плазмы // Журнал прикладной спектроскопии. 1991. Т. 54. № 5. С. 825-832.
21. Романов Г.С., Степанов К.Л., Станчиц Л.К. Влияние реабсорбции излучения в линиях на кинетические характеристики неравновесной плазмы. – Минск: Изд-во Института тепло- и массо-обмена им. А.В. Лыкова АН БССР, 1994. – 37 с.
22. Гаврилова А.Ю., Киселёв А.Г., Скороход Е.П., Станишевская М.Е. Столкновительно-излучательное равновесие в плазме благородных газов // Математическое моделирование. 1996. Т. 8. № 6. С. 103-108.
23. Семиохин И.А. Элементарные процессы в низкотемпературной плазме. – М.: Изд-во Московского университета, 1988. – 142 с.
24. Гаврилова А.Ю., Скороход Е.П. Сечения и константы скоростей плазмохимических реакций инертных газов. – М.: Изд-во МАИ, 2011. – 192 с.
25. Голубовский Ю.Б., Кудрявцев А.А., Некучаев В.О., Порохова И.А., Цендин Л.Д. Кинетика электронов в неравновесной газоразрядной плазме. - СПб.: Изд-во Санкт-Петербургского университета, 2004. - 248 с.
26. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. - М.: Наука, 1974. – 822 с.
27. Грим Г. Спектроскопия плазмы. – М.: Атомиздат, 1969. – 452 с.
28. Икрамов Х.Д. Несимметричная проблема собственных значений. Численные методы. - М.: Наука, 1991. - 325 с.

29. Серебрякова И.Е. Рекуррентные решения несимметричной спектральной задачи и их тригонометрическое представление. – М.: Изд-во МАИ, 2014. – 96 с.

## References

1. Losev S.A., Sergievskaya A.L. *Materialy VII Mezhdunarodnoi konferentsii po neravnovesnym protsessam v soplakh i struyakh*, Moscow, Izd-vo MAI, 2008, pp. 286–288.
2. *IX Mezhdunarodnyi simpozium po radiatsionnoi plazmodinamike: sbornik nauchnykh trudov*, Moscow, Izd-vo NITs «Inzhener», 2012. 283 p.
3. Kryukov V.G. Iskhakova R.L., Durigon A. *Materialy VI Mezhdunarodnoi konferentsii po neravnovesnym protsessam v soplakh i struyakh*, Moscow, Izd-vo MAI, 2006, pp. 220–222.
4. Abdullin A.L., Kryukov V.G., Berezovskaya K.A. *Materialy XI Mezhdunarodnoi konferentsii po neravnovesnym protsessam v soplakh i struyakh*, Moscow, Izd-vo MAI, 2016, pp. 116-118.
5. Kryukov V.G., Abdullin A.L., Demin A.V., Safiullin I.I. *Trudy MAI*, 2017, no. 92.  
URL: <http://trudymai.ru/eng/published.php?ID=76848>
6. Chebakova V.Yu. *Uchenye zapiski Kazanskogo universiteta. Seriya: Fiziko-matematicheskie nauki*, 2016, vol. 158, no. 3, pp. 404-423.
7. Polak L.S., Gol'denberg M.Ya., Levitskii A.A. *Vychislitel'nye metody v khimicheskoi kinetike* (Computational methods in chemical kinetics), Moscow, Nauka, 1984. 280 p.

8. Pirumov U.G., Roslyakov G.S. *Chislennyye metody gazovoi dinamiki* (Numerical methods of gas dynamics), Moscow, Vysshaya shkola, 1987, 232 p.
9. Kollatts L. *Zadachi na sobstvennyye znacheniya* (Tasks for eigenvalues), Moscow, Nauka, 1968, 501 p.
10. Chernyi G.G., Losev S.A. *Fiziko-khimicheskie protsessy v gazovoi dinamike: spravochnik. T.I.* (Physico–chemical processes in gas dynamics. Vol. I), Moscow, Izd-vo Moskovskogo universiteta, 1995, 343 p.
11. Chernyi G.G., Losev S.A. *Fiziko–khimicheskie protsessy v gazovoi dinamike: spravochnik. T.II* (Physico–chemical processes in gas dynamics. Vol. II), Moscow, Nauchno–izdatel'skii tsentr mekhaniki, 2002, 368 p.
12. Hyun-Kyung Chung, Mi-Young Song, Ji-Won Kwon et al. Population Kinetics Modeling of Low-Temperature Argon Plasma, *Atoms*, 2021, vol. 9, no. 4, pp. 100. URL: <https://doi.org/10.3390/atoms9040100>
13. Kil-Byoung Chai, Duck-Hee Kwon. Optical emission spectroscopy and collisional-radiative modeling for non-equilibrium, low temperature helium plasma, *Spectrochimica Acta Part B Atomic Spectroscopy*, 2021, vol. 183, pp. 106269. DOI:[10.1016/j.sab.2021.106269](https://doi.org/10.1016/j.sab.2021.106269)
14. Krivoruchko D.D., Skrylev A.V., Skorokhod E.P. *Trudy MAI*, 2017, no 92. URL: <http://trudymai.ru/eng/published.php?ID=76859>
15. Gavrilova A.Yu., Kiselev A.G., Skorokhod E.P. *Teplofizika vysokikh temperature*, 2014, vol. 52, no. 2, pp. 174–185.

16. Morozov A.I. *Vvedenie v plazmodinamiku* (Introduction to plasmodynamics), Moscow, Fizmatlit, 2008, 616 p.
17. Chmykhova N.A. *Matematicheskie modeli formirovaniya ravnovesnykh konfiguratsii plazmy v magnitnykh lovushkakh – galateyakh. Diss. kand. f-m. nauk* (Mathematical models of formation of equilibrium plasma configurations in magnetic traps - Galateas. PhD thesis), Moscow, Keldysh Institute of Applied Mathematics Russian Academy of Science, 2015, 127 p.
18. Chirkov A.Yu. *Vestnik MGTU im. N.E. Baumana. Seriya: Estestvennyye nauki*, 2006, no. 2, pp. 115-124.
19. Gordeev A.V. *Fizika plazmy*, 2010, vol. 36, no. 1, pp. 33-52.
20. Romanov G.S., Stepanov K.L., Stanchits L.K. *Zhurnal prikladnoi spektroskopii*, 1991, vol. 54, no. 5, pp. 825-832.
21. Romanov G.S., Stepanov K.L., Stanchits L.K. *Vliyanie reabsorbtsii izlucheniya v liniyakh na kineticheskie kharakteristiki neravnovesnoi plazmy* (The effect of reabsorption of radiation in the lines on kinetic characteristics of nonequilibrium plasma), Minsk, Izd-vo Instituta teplo- i masso-obmena im. A.V. Lykova AN BSSR, 1994, 37 p.
22. Gavrilova A.Yu., Kiselev A.G., Skorokhod E.P., Stanishevskaya M.E. *Matematicheskoe modelirovanie*, 1996, vol. 8, no. 6, pp. 103-108.
23. Semiokhin I.A. *Elementarnye protsessy v nizkotemperaturnoi plazme* (Elementary processes in low temperature plasma), Moscow, Izd-vo Moskovskogo universiteta, 1988, 142 p.

24. Gavrilova A.Yu., Skorokhod E.P. *Secheniya i konstanty skorostei plazmokhimicheskikh reaktsii inertnykh gazov* (Cross sections and rate constants of plasma chemical reactions of inert gases), Moscow, Izd-vo MAI, 2011, 192 p.
25. Golubovskii Yu.B., Kudryavtsev A.A., Nekuchaev V.O., Porokhova I.A., Tsendin L.D. *Kinetika elektronov v neravnovesnoi gazorazryadnoi plazme* (Kinetics of electrons in a nonequilibrium gas-discharge plasma), Saint Petersburg, Izd-vo Sankt-Peterburgskogo universiteta, 2004, 248 p.
26. Korn G., Korn T. *Spravochnik po matematike* (Handbook of Mathematics), Moscow, Nauka, 1974, 822 p.
27. Grim G. *Spektroskopiya plazmy* (Spectroscopy of plasma), Moscow, Atomizdat, 1969, 452 p.
28. Ikramov Kh.D. *Nesimmetrichnaya problema sobstvennykh znachenii. Chislennyye metody* (An asymmetric eigenvalue problem. Numerical methods), Moscow, Nauka, 1991, 325 p.
29. Serebryakova I.E. *Rekurrentnye resheniya nesimmetrichnoi spektral'noi zadachi i ikh trigonometricheskoe predstavleniye* (Recurrent solutions of asymmetrical spectral problems and their trigonometric representation), Moscow, Izd-vo MAI, 2014, 96 p.

Статья поступила в редакцию 16.02.2022; одобрена после рецензирования 11.03.2022; принята к публикации 20.04.2022

The article was submitted on 16.02.2022; approved after reviewing on 11.03.2022; accepted for publication on 20.04.2022.