

УДК537.525

АНАЛИЗ КИНЕТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ТЛЕЮЩЕМ РАЗРЯДЕ В МОЛЕКУЛЯРНОМ ВОДОРОДЕ

Сторожев Д.А.^{1,2,3}, Суржиков С.Т.¹, Куратов С.Е.²

¹*Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук,
Москва, 119526, проспект Вернадского 101-1*

²*Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова
Москва, 127055, Суцневская ул., д.22*

³*Московский физико-технический институт (государственный университет),
Московская область, г. Долгопрудный, 141700, Институтский пер., 9
dmitry.stor@gmail.com*

Аннотация

В данной работе приводится обзор работ по моделированию физико-химических свойств и химического состава плазмы, образующейся в источниках ионов водорода и его изотопов. Приводятся результаты численного моделирования кинетики ионизации и диссоциации молекулярного водорода в плазме тлеющего и пеннинговского разряда.

Ключевые слова: кинетика ионизации и диссоциации, молекулярный водород, пеннинговский разряд, неравновесные физико-химические процессы.

ANALYSIS OF KINETIC PROCESSES IN THE GLOW DISCHARGE IN MOLECULAR HYDROGEN

Storozhev D.A.^{1,2,3}, Surzhikov S.T.¹, Kuratov S.E.²

¹*Ishlinskiy Institute for problems in mechanics RAS (IPMech RAS),
Russia, Moscow, 119526*

²*All-Russian Scientific Research Institute of Automatics,
Russia, Moscow 127055*

³*Moscow Institute of Physics and Technology (State University)
Russia, Dolgoprudny, Moscow Region, 1417009*

A review of papers on simulation of physical-chemical properties and chemical composition of plasma, generated in the hydrogen and its isotopes in the ion sources is presented. The results of numerical simulation of the ionization and dissociation kinetics of molecular hydrogen in glow discharge and penning discharge plasma are given.

Keywords: physical and chemical kinetics, molecular hydrogen, Penning discharge, non-equilibrium processes

1. Введение

Одной из наиболее важных характеристик, определяющих эффективность работы источников ионов, является химический состав образующейся в источнике газоразрядной плазмы. Химический состав частично ионизированной плазмы тлеющего разряда определяется процессами набора электронами и ионами энергии в скрещенных электрическом и магнитном полях, а также неупругими столкновениями частиц, такими как, ионизация электронным ударом, возбуждение колебательных и электронных уровней, диссоциация молекул газа. Скорость протекания данных процессов определяется сечениями рассеяния электронов на атомах и молекулах и характерной энергией, набираемой электронами в электромагнитном поле

В данной работе приводится обзор работ по моделированию физико-химических свойств и химического состава плазмы, образующейся в источниках ионов. Также выполнены расчеты компонентного состава газоразрядной плазмы тлеющего разряда в широком диапазоне температуры электронов.

2. Обзор литературы

Интерес к исследованию плазмы молекулярного водорода и его изотопов в низкотемпературной плазме газовых разрядов, таких как пеннинговский, тлеющий и высокочастотный разряды, связан с разработкой различных электрофизических приборов на их основе (ионные двигатели, генераторы нейтронов, источники ионов). Большое количество экспериментальных и теоретических данных по сечениям рассеяния электронов на атомах и молекулах водорода и его изотопов [1]–[3], появившихся в последнее время, а также растущая производительность вычислительной техники позволяют создавать и развивать компьютерные модели разрядов, учитывающих всю сложность и многообразие физико-химических процессов, протекающих в области горения разряда.

Упрощенная радиационно-столкновительная модель (табл. 1), основанная на системе кинетических «поуровневых» уравнений (учитывается 28 возбужденных энергетических уровней) для колебательных состояний основного электронного терма молекулы H_2 , а также включающая различные механизмы ионизации и диссоциации представлена в работе [4]. На основе разработанной авторами модели с учетом предположения о квазистационарной кинетических процессов и «равновесности» функции распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ), авторами рассчитываются константы скорости ионизации и диссоциации молекулы водорода электронным ударом в широком диапазоне концентраций нейтральных молекул газа и температуры электронов, анализируются различные механизмы ионизации и диссоциации. В работе использовались доступные в литературе сечения рассеяния электронов на молекулах в основном электронном состоянии, а также описан метод оценки сечений возбуждения с более высоких ($n > 2$) энергетических состояний. Авторами утверждается, что основным механизмом ионизации в плазме молекулярного водорода является прямая ионизация электронным ударом, а основным механизмом диссоциации является диссоциация из нестабильного электронного состояния $H_2(b^3\Sigma_u^+)$, также возбуждаемого электронами.

В работе [5] выполнено самосогласованное моделирование на основе метода Монте-Карло характеристик разряда, образующегося в радиально сходящемся цилиндрическом устройстве инерциального термоядерного синтеза. Уравнения разработанной авторами модели являются двухмерными и не зависят от времени. Учитывается компонентный состав плазмы и столкновения с нейтральными молекулами газа. Кинетическая схема, описанная в работе, включает столкновения только с нейтральными молекулами газа, при этом моделируются только столкновения, имеющие наибольшие вероятности (сечения рассеяния), а обратные реакции не учитываются. Описанные в работе процессы включают следующие типы взаимодействия: электрон-молекула, атом-ион, молекула-ион, столкновения с быстрыми (частицы с высокой энергией) атомами и молекулами (табл. 2). Основная особенность предложенной в [5] модели заключается в учитываемых в кинетической схеме реакциях с участием быстрых частиц. Авторами было показано, что ядерные реакции в описываемом устройстве, возникают не только с участием ионов, но и с участием высокоэнергетических нейтральных молекул и атомов (73 ÷ 94 % всех процессов термоядерного синтеза).

В работах [6] рассчитывалась функция распределения электронов по энергиям в плазме источника Пеннинга на основе решения кинетического уравнения Больцмана в Лоренцевом приближении. Авторами отмечается, что в случае высокой степени ионизации плазмы распределение электронов становится равновесным, поэтому в этом случае допустимо использовать функцию распределения Максвелла для расчета констант скоростей и коэффициентов переноса. В случае же, если плазма слабоионизованная, имеет место отклонение

ФРЭЭ от равновесной, поэтому при моделировании кинетических процессов необходимо решать уравнение Больцмана. При расчете функции распределения авторами учитывались следующие виды взаимодействия частиц: упругие $e\text{-H}_2$ столкновения, упругие $e\text{-e}$ столкновения, неупругие и сверхупругие $e\text{-H}_2$ (табл. 3). В работе показано, что высокоэнергетический хвост функции распределения приходит в стационарное состояние за время не более, чем за 0.5 мкс, в то время как в низкоэнергетической области энергетического спектра стационарные значения достигаются за время 50 мкс. В работе также исследовалось влияние наличия атомарного водорода на ФРЭЭ. Было показано, что присутствие атомарной примеси в молекулярном водороде приводит к обогащению электронами низкоэнергетической ($\varepsilon < 5$ eV) и высокоэнергетической области спектра ($\varepsilon > 12$ eV) и опустошению в области средних ($5 < \varepsilon < 12$ eV) энергий.

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

В работах [7], [8] выполнено двумерное численное моделирование замагниченной плазмы в разряде низкого давления, основанное на «гибридном» кинетическом подходе к решению уравнения Больцмана. Расчеты были выполнены для диапазона давлений 1–2 Па, когда длина свободного пробега частиц сравнима с характерным размером области горения разряда. В предложенном авторами подходе предлагается разделить область интегрирования уравнения Больцмана на две подобласти: низкоэнергетическую, где применялось «классическое» нелокальное приближение, и область высоких энергий, где решалось дифференциальное уравнение в частных производных в зависимости от двух пространственных координат и полной энергии частиц. Сравнение полученных авторами результатов показывает удовлетворительное согласие с экспериментальными данными для диапазона давлений $p = 5 \div 20$ мТорр.

В работе [9] представлена кинетическая схема неравновесных химических процессов в сильноионизированной водородной плазме импульсного разряда. Предложенная авторами кинетическая схема включает процессы взаимодействия электронов с атомами и молекулами (включая систему процессов колебательного возбуждения молекул), колебательную кинетику молекул H_2 , а также химические реакции с участием атомарного водорода, положительных и отрицательных ионов (табл. 5). В работе показано, что в рассматриваемых условиях нейтральный газ нагревается до относительно высоких температур (по порядку становится равна температуре электронов), что происходит в основном за счет диссоциативного возбуждения молекул электронным ударом, а степень диссоциации достигает $[\text{H}]/[\text{H}_2]=1$, а доля атомарных ионов равна $[\text{H}^+]/[\text{H}_2^+]>0.9$.

В работах [10], [11] описывается база данных неупругих сечений рассеяния электронов на колебательно возбужденных молекулах водорода и его изотопах. База данных включает следующие неупругие процессы: диссоциативное и недиссоциативное возбуждение электронным ударом, ионизация электронным ударом, ступенчатые процессы колебательного возбуждения и диссоциации, диссоциативное прилипание и резонансный захват электрона (табл. 6). Часть представленных в работе данных по сечениям рассеяния была взята из имеющихся литературных данных, а часть рассчитаны теоретически. В частности, сечения диссоциативного прилипания и колебательного возбуждения были рассчитаны в рамках резонансной теории.

В работах [12]–[16] выполнено самосогласованное численное моделирование, основанное на решении кинетического уравнения Больцмана для электронов и системы уравнений для заселенностей колебательных уровней молекул водорода. Авторами рассчитывались коэффициенты переноса, константы скорости возбуждения и диссоциации, а также доли энергии, вкладываемой частицами в возбуждение внутренних степеней свободы молекул, ионизацию, диссоциацию и нагрев молекул газа. Авторами отмечается, что рассчитанные в рамках разработанной модели степени диссоциации и колебательной температуры составляют $\frac{[H]}{[H]+[H_2]} \approx 0.03$, $\theta \approx 1300$ К при токе разряда $I=1$ А и $\frac{[H]}{[H]+[H_2]} \approx 0.3$, $\theta \approx 2200$ К

при токе разряда $I=10$ А и находятся в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными. Кинетическая схема, используемая в работе [12], представлена в табл. 7.

В работе [17] выполнено *ab-initio* моделирование источника отрицательных ионов. Описанная в работе модель основана на согласованном решении кинетического уравнения Больцмана для электронов и уравнений колебательной кинетики молекулярного водорода для расчета процессов происходящих в области горения разряда, а также моделирования «послеразрядных» процессов на основе метода «частица в ячейке» и расчета столкновений методом Монте-Карло. Отдельно в работе обсуждаются вопросы, связанные с кинетикой возбуждения триплетных состояний молекулы H_2 . Используемая в работе кинетическая схема приведена в табл. 8.

В работе [18] описывается самосогласованная модель, основанная на решении системы уравнений колебательной кинетики, уравнений химической кинетики, а также уравнения Больцмана для электронов. Авторами работы были рассчитаны коэффициенты переноса в плазме молекулярного водорода, доли энергии, вкладываемые электронами в поступательные, колебательные и вращательные степени свободы молекул, а также константы скорости диссоциации. Было показано, что колебательная температура молекул нейтрального газа растет до нескольких тысяч кельвинов, а сверхупругие столкновения отвечают за формирование высокоэнергетического хвоста функции распределения электронов, определяющего константы скорости возбуждения электронных термов молекулы водорода. Сообщается также о существенном влиянии V-T процессов на формирование колебательной функции распределения молекулярного водорода; благодаря V-T процессам сильно уменьшается количество молекул с высокими колебательными квантовыми числами. Это по мнению авторов является причиной того, что диссоциации в плазме молекулярного водорода происходит в основном электронным ударом, в отличие, например, от плазмы в N_2 , где определяющую роль играют процессы V-V и V-T диссоциации.

В работе [19] предложен метод моделирования поведения заряженных частиц, основанный на решении уравнения Фоккера – Планка, в источнике ионов на основе электронного циклотронного резонанса. Авторами предлагается новый метод решения интегродифференциального уравнения Фоккера – Планка. В работе показано, что полученные расчетные данные удовлетворительно согласуются с экспериментальными результатами. Однако предложенная модель не позволяет выполнить расчеты распределения заряда ионов, а также выполнить расчет распределения заряженных частиц согласованно с расчетом потенциала электрического поля.

Численное моделирование процессов переноса атомарного водорода в ионном источнике на основе трехмерного моделирования методом Монте-Карло выполнено в работах [20], [21]. Моделирование было выполнено для ионного источника «ЖАЕА». В работе рассчитывались концентрации атомарного водорода, образующегося в газоразрядной плазме. Авторами было показано, что ФРЭЭ в таком источнике может быть аппроксимирована двухтемпературным Максвелловским распределением. При этом высокоэнергетический «хвост» распределения оказывает существенное влияние на скорость процессов диссоциа-

ции водорода и образования отрицательных атомарных ионов H^- . Кинетическая схема, используемая в работе [20], представлена в табл. 9.

Численное моделирование источника ионов «JAEA» на основе метода Монте-Карло также выполнено в работе [22]. В предложенной модели (табл. 10) столкновения электронов между собой моделировалось с использованием модели «парных столкновений», а столкновения с молекулами водорода методом «null-collision». В работе отмечается, что рассчитанная ФРЭЭ состоит преимущественно из двух групп электронов: низкоэнергетической с $T_e \approx 3 \text{ eV}$, и высокоэнергетической с $T_e \approx 20 \text{ eV}$.

В работах [23], [24] описана модель ионного источника, включающая плазмохимию, поглощение плазмой энергии электромагнитного поля, движение заряженных частиц в скрещенном электромагнитном поле. Различные сорта частиц описываются уравнениями сохранения непрерывности, сохранения момента и энергии, включая магнитное поле, инерцию и вязкость. Предполагается, что электроны имеют Максвелловское распределение по энергиям. Электростатическое взаимодействие электронов и ионов описывается уравнением Пуассона. В работе показано, что температура электронов в разрядной камере достигает 17 eV. При этом температура нейтральных молекул газа H_2 составляет 0.1 eV, а температура атомов H равна 1 eV. В работе выполнены расчеты пространственного распределения молекулярных ионов и молекул нейтрального газа. Было показано, что относительное количество ионов H_3^+ мало по сравнению с концентрацией ионов H^+ и H_2^+ во всей области горения разряда.

В работе [25] рассчитывался химический состав плазмы молекулярного водорода в разряде постоянного тока. Авторами проводились расчеты концентрации атомов H , а также различных ионов H_2^+ , H_3^+ , H^+ на основе нуль-мерной кинетической модели (используемая авторами кинетическая схема представлена в табл. 11), а также проводилось сравнение с экспериментальными измерениями химического состава методами оптической спектроскопии и масс-спектрометрии. Авторами отмечается, что в рассматриваемых условиях степень ионизации составляет 10^{-4} , степень диссоциации при этом равна 0.1, а основным ионом является H_3^+ , за исключением случая очень низких давлений (в этом случае основным ионом является H_2^+).

В работах [26], [27] методом Монте-Карло было рассчитано равновесное колебательное распределение молекул H_2 в области горения разряда и в области извлечения ионов высокочастотного источника отрицательных ионов. В работе показано, что определяющую роль в заселении нижних колебательных состояний молекул играют Vt -VT, AV и ev процессы, в то время как верхние колебательные состояния заселяются преимущественно за счет eV, AV, и sV₂ процессов (табл. 12).

В работах [28]–[31] получены экспериментальные данные по измерению степени диссоциации, колебательной, вращательной и поступательной температур молекулярного водорода в источниках ионов. В работе также исследовалось влияние изотопного состава плазмы на концентрацию ионов, извлекаемых из источника. В частности авторами было показано, что для одних и тех же условий горения разряда концентрация ионов D^- в области извлечения ионов выше, чем концентрация ионов H^- .

В разделе 3 приведены кинетические схемы, используемые для расчета компонентного состава плазмы молекулярного водорода, а также условия, для которых выполнялось моделирование.

3. Кинетические схемы, используемые в работах [1]–[27] для расчета компонентного состава плазмы

Таблица 1

Кинетическая схема из работы [4]

Компоненты	Реакции	Рассматриваемые в работе условия
<p>Синглетные состояния $B^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$, E, $F^1\Sigma_g^+$</p> <p>Триплетные состояния $b^3\Sigma_u^+$, $c^3\Pi_u$, $a^3\Sigma_g^+$</p> <p>Колебательно-возбужденные состояния $n=28$</p> <p>Ионы H_2^+, H^+</p> <p>Атомы H</p>	<p>ИОНИЗАЦИЯ</p> <p>1. $H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow H_2^+(X^2\Sigma_g^+) + e + e$</p> <p>2. $H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow H_2^* + e$</p> <p>$H_2^* + e \rightarrow H_2^{**} + e$</p> <p>$H_2^{**} + e \rightarrow H_2^+(X^2\Sigma_g^+) + e + e$</p> <p>3. $H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow H(1s) + H^+ + e$</p> <p>4. $H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow H(1s) + H^* + e$</p> <p>$H^* + e \rightarrow H^{**} + e$</p> <p>$H^{**} + e \rightarrow H^+ + e + e$</p> <p>ДИССОЦИАЦИЯ</p> <p>1. $H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow H_2(b^3\Sigma_u^+) + e$</p> <p>$H_2(b^3\Sigma_u^+) \rightarrow H(1s) + H(1s)$</p> <p>2. $H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow H_2^* + e$</p> <p>$H_2^* + e \rightarrow H_2(b^3\Sigma_u^+) + e$</p> <p>$H_2(b^3\Sigma_u^+) \rightarrow H(1s) + H(1s)$</p> <p>3. $H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow H(1s) + H^* + e$</p> <p>4. $H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow H(1s) + H^* + e$</p> <p>$H^* + e \rightarrow H(1s)$</p> <p>$H_2 + e \rightarrow H(1s) + H^+ + e + e$</p>	<p>Температура электронов: $T_e = 5 \div 100 \text{ eV}$</p> <p>Плотность электронов: $n_e = 10^8 \div 10^{16} \text{ cm}^{-3}$</p>

Таблица 2

Кинетическая схема из работы[5]

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

Таблица 3

Кинетическая схема из работы [6]

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

Таблица 4

Кинетическая схема из работы [1]

Компоненты	Реакции	Рассматриваемые в работе условия
<p>Синглетные состояния: $B^1\Sigma_u^+$, $D^1\Pi_u$</p> <p>Атомы: D, H</p> <p>Колебат. и вращат. состояния: $H_2(X^1\Sigma_g^+, v, j)$ $v=14, j=16$</p>	<p>НЕПРЯМОЕ КОЛЕБАТЕЛЬНОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ H_2:</p> <p>1. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+, v') + e \rightarrow H_2(X^1\Sigma_g^+, v_f) + e + hv$</p> <p>2. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+, v') + e \rightarrow H_2(X^1\Sigma_g^+, v_f) + e + hv$</p> <p>СТУПЕНЧАТАЯ ДИССОЦИАЦИЯ H_2:</p> <p>3. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+, v') + e \rightarrow H+H + e + hv$</p> <p>4. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+, v') + e \rightarrow H+H + e + hv$</p> <p>НЕПРЯМОЕ КОЛЕБАТЕЛЬНОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ D_2:</p> <p>5. $D_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow D_2(B^1\Sigma_u^+, v') + e \rightarrow D_2(X^1\Sigma_g^+, v_f) + e + hv$</p> <p>6. $D_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow D_2(B^1\Sigma_u^+, v') + e \rightarrow D_2(X^1\Sigma_g^+, v_f) + e + hv$</p> <p>СТУПЕНЧАТАЯ ДИССОЦИАЦИЯ D_2:</p> <p>7. $D_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow D_2(B^1\Sigma_u^+, v') + e \rightarrow D+D + e + hv$</p> <p>8. $D_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow D_2(B^1\Sigma_u^+, v') + e \rightarrow D+D + e + hv$</p> <p>ДИССОЦИАЦИИ ЧЕРЕЗ СТОЛКНОВЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ И АТОМА:</p> <p>9. $D_2(X^1\Sigma_g^+, v, j) + D = D + D + D$</p> <p>10. $H_2(X^1\Sigma_g^+, v, j) + H = H + H + H$</p>	

Таблица 5

Кинетическая схема из работы [9]

Компоненты	Реакции	Рассматриваемые в работе условия
<p>Синглетные состояния $B^1\Sigma_u^+, C^1\Pi_u, E, F^1\Sigma_g^+, B'^1\Sigma_u^+, D^1\Pi_u, B''^1\Sigma_u^+, D'^1\Pi_u$</p> <p>Триплетные состояния $b^3\Sigma_u^+, c^3\Pi_u, a^3\Sigma_g^+, d^3\Sigma_g^+, e^3\Sigma_g^+$</p> <p>Колебательные состояния: $\nu=14$ (and rotational)</p> <p>Ионы $H_2^+, H_3^+, H_5^+, H^+, H^-$</p> <p>АТОМЫ H</p>	<p>НЕУПРУГИЕ СТОЛКНОВЕНИЯ</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. $e + H_2(X, v, j) \rightarrow e + H_2(X, v, j + 2)$ 2. $e + H_2(X, v) \rightarrow e + H_2(X, v'), v' - v \leq 3$ 3. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(Y) + e,$ где $Y = b^3\Sigma_u^+, c^3\Pi_u, a^3\Sigma_g^+, d^3\Sigma_g^+, e^3\Sigma_g^+$ 4. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(Y') + e,$ где $Y' = B^1\Sigma_u^+, C^1\Pi_u, B'^1\Sigma_u^+, D^1\Pi_u, B''^1\Sigma_u^+, D'^1\Pi_u$ 5. $H_2(X) + e \rightarrow H_2(E, F^1\Sigma_u^+) + e$ 6. $H(n=1) + e \rightarrow H(n'=2) + e$ 7. $H(n) + e \rightarrow H(n' > 2) + e$ 8. $H^- + e \rightarrow H + e + e$ <p>ИОНИЗАЦИЯ</p> <ol style="list-style-type: none"> 9. $H + e \rightarrow H^- + H$ 10. $H(n=1) + e \rightarrow H^+ + e + e$ 11. $H(n > 1) + e \rightarrow H^+ + e + e$ 12. $H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow H_2^+(X^2\Sigma_g^+, X^2\Sigma_u^+) + e$ 13. $H_2^+ + e \rightarrow H^+ + H + e$ 14. $H_3^+ + e \rightarrow H^+ + H + H + e$ 15. $H_5^+ + e \rightarrow H_3^+ + H_2 + e$ <p>ДИССОЦИАЦИЯ</p> <ol style="list-style-type: none"> 16. $H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow 2H(n=1) + e$ 17. $H_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightarrow H(n=1) + H(n=2) + e$ <p>КОЛЕБАТЕЛЬНАЯ КИНЕТИКА:</p> <ol style="list-style-type: none"> 18. $H_2(X, v) + H_2(X, w+1) \rightarrow H_2(X, v+1) + H_2(X, w)$ <p>СТОЛКНОВЕНИЯ С УЧАСТИЕМ АТОМОВ</p> <ol style="list-style-type: none"> 19. $H(n=2) + H_2(X^1\Sigma_g^+, v) \rightarrow$ $\rightarrow H(n=1) + H_2(b^3\Sigma_u^+) \rightarrow 3H(n=1)$ 20. $H + H + H_2 \leftrightarrow H_2(X, v=14) + H_2$ 21. $H + H + H \leftrightarrow H_2(X, v=14) + H$ 22. $H(n) \rightarrow H(n') + hv$ 	<p>Давление: $p = 1$ Торр</p> <p>Разрядный ток: $I = 300$ А</p> <p>Плотность электронов: $n_e \approx 10^{15} \text{ cm}^{-3}$</p>

Таблица 6

Кинетическая схема из работ [10], [11]

Компоненты	Реакции
Синглетные состояния $B^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$, E , $F^1\Sigma_g^+$, $B^1\Sigma_u^+$, $D^1\Pi_u$, $B'^1\Sigma_u^+$, $D^1\Pi_u$ Триплетные состояния $b^3\Sigma_u^+$ Колебат. возбужд. состояния $\nu=20$ Ионы H_2^+ , H^+ , H^- Атомы H	ДИССОЦИАТИВНОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ: 1. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow H(1s) + H(2l) + e$ 2. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(C^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow H(1s) + H(2l) + e$ 3. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(I^1\Pi_g) + e \rightarrow H(1s) + H(2l) + e$ 4. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow 2H + e$ 5. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(D^1\Pi_u) + e \rightarrow 2H + e$ 6. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(B''^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow 2H + e$ 7. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(D^1\Pi_u) + e \rightarrow 2H + e$ 8. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(b^3\Sigma_u^+) + e \rightarrow H(1s) + H(1s) + e$ 9. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2^*(B^1\Sigma_u^+, C^1\Pi_u) + e \rightarrow$ $\rightarrow H_2(X^1\Sigma_g^+) + e + hv \rightarrow H(1s) + H(1s) + e + hv$ ИОНИЗАЦИЯ: 10. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(X^2\Sigma_g^+) + 2e \rightarrow H(1s) + H^+ + 2e$ 11. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(^2\Sigma_u^+) + 2e \rightarrow H(1s) + H^+ + 2e$ 12. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2^+(X^2\Sigma_g^+) + 2e$ ВОЗБУЖДЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ: 13. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+) + e$ 14. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(C^1\Sigma_u^+) + e$ 15. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(I^1\Pi_g) + e$ 16. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+) + e$ 17. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(D^1\Pi_u) + e$ 18. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(B''^1\Sigma_u^+) + e$ 19. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(D^1\Pi_u) + e$ СТУПЕНЧАТОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ: 20. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2^*(B^1\Sigma_u^+, C^1\Pi_u) + e \rightarrow$ $\rightarrow H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_f) + e + hv$ ДИССОЦИАТИВНОЕ ПРИСОЕДИНЕНИЕ ЭЛЕКТРОНА: 21. $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu_i) + e \rightarrow H_2(^2\Sigma_u^+) + e \rightarrow H(1s) + H^-(1s^2)$

Таблица 7

Кинетическая схема из работы [12]

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

Таблица 8

Кинетическая схема из работы [17]

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

Таблица 9

Кинетическая схема из работы [20]

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

Таблица 10

Кинетическая схема из работы [22]

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

Таблица 11

Кинетическая схема из работы [25]

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

Таблица 12

Кинетическая схема из работы [26], [27]

Компоненты	Реакции	Рассматриваемые в работе условия
Синглетные состояния $B^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$, $B^1\Sigma_u^+$, $D^1\Pi_u^+$, $BU\Sigma$ Триплетные состояния $a^3\Sigma_u^+$, $e^3\Sigma_u^+$, $c^3\Pi_u$, $b^3\Sigma_u^+$ Колеб. возб. сост. $\nu=15$ Ионы H_2^+ , H^+ Атомы H	С УЧАСТИЕМ ЭЛЕКТРОНОВ 1. $H + e \rightarrow H + e$ 2. $H + e \rightarrow H^+ + e + e$ 3. $H_2(v) + e \rightarrow H_2(w) + e$ (eV) 4. $H_2(v) + e \rightarrow H_2(w) + e + hv$ (EV) 5. $H_2(v) + e \rightarrow H_2^* + e$ (eE) via: $B^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$, $D^1\Pi_u$, $B^1\Sigma_u^+$, $D^1\Pi_u^+$, $BU\Sigma$, $a^3\Sigma_u^+$ 6. $H_2(v) + e \rightarrow H_2^+ + e + e$ (eI) 7. $H_2 + e \rightarrow H + H + e$ (eD) via: $B^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$, $D^1\Pi_u$, $B^1\Sigma_u^+$, $D^1\Pi_u^+$, $BU\Sigma$, $e^3\Sigma_u^+$, $c^3\Pi_u$, $b^3\Sigma_u^+$ 8. $H_2 + e \rightarrow H + H^+ + e + e$ (eDI) via: $X^2\Sigma_g^+$, $^2\Sigma_u$ 9. $H_2(v) + e \rightarrow H + H^+$ (DA) СТОЛКНОВЕНИЯ ТЯЖЕЛЫХ ЧАСТИЦ 10. $H + H^+ \rightarrow H^+ + H$ 11. $H_2(v) + H^+ \rightarrow H_2(w) + H^+$ (pV) 12. $H_2(v) + H^+ \rightarrow H_2^+ + H$ (p-CX) 13. $H_2(v) + H^+ \rightarrow H^+ + H + H$ (pV-diss) 14. $H_2(v) + H \rightarrow H_2(w) + H$ (Vt) 15. $H_2(v) + H \rightarrow H + H + H$ (Vt-diss) 16. $H_2(v) + H_2(w) \rightarrow H_2(v \pm 1) + H_2(w)$ (VT) 17. $H_2(14) + H_2(w) \rightarrow H + H + H_2(w)$ (VT-diss) РЕАКЦИИ НА ПОВЕРХНОСТИ 18. $H_2^+ + wall \rightarrow H_2(w)$ (sV ₂) 19. $H + Cu \rightarrow H_{ad} + Cu$ $H + H_{ad} + Cu \rightarrow H_2(w) + Cu$ (AV)	Давление: $p \approx 2$ мТорр Подводимая мощность: $W \approx 170$ kW Ток: $I = 150$ mA Частота: 1 MHz

4. Численное моделирование кинетики ионизации и диссоциации водорода

В предыдущем разделе отмечалось, что в ряде работ по численному моделированию плазмы пеннинговского разряда в молекулярном водороде считается, что основным механизмом диссоциации и ионизации молекулярного водорода являются диссоциация и ионизация электронным ударом [20], [26], [27], [32]. При этом отмечается, что процессы диссоциации могут происходить ступенчатым образом (например, через возбуждение различных электронно-колебательных состояний молекулы водорода). В частности, в работе [4] утверждается, что процесс диссоциативного распада возбужденного состояния $H_2^*(b^3\Sigma_u^+)$ является основным механизмом диссоциации молекул водорода.

В данной работе рассматриваются три различных механизма диссоциации молекулярного водорода: диссоциация через возбуждение нестабильного триплетного электронного состояния молекулы $H_2^*(b^3 \Sigma_u^+)$; прямая диссоциация электронным ударом с возбуждением одного из атомов в состояние $H(n=2)$ или $H(n=3)$. Помимо процессов диссоциации в кинетическую схему включены процессы ионизации молекул и атомов водорода электронным ударом. Сечения рассеяния электронов для данных процессов были взяты из базы данных [34]. Используемые в расчете сечения рассеяния электронов на атомах и молекулах водорода приведены на рис. 1.

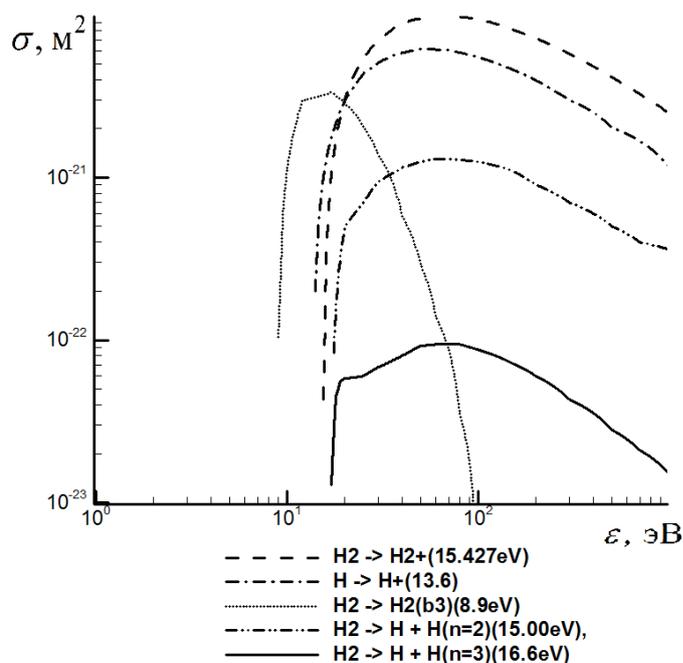
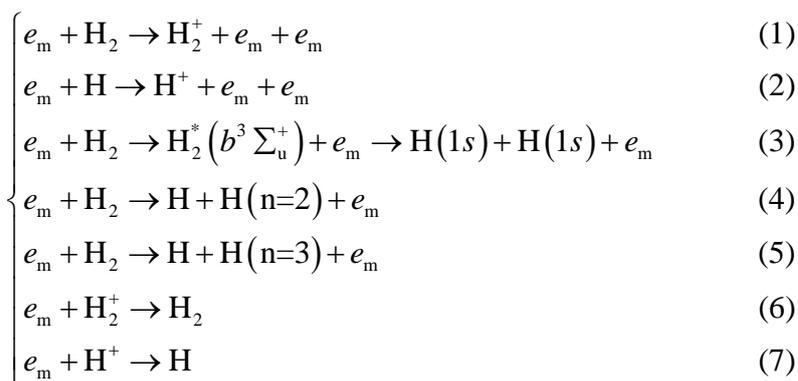


Рис. 1. Используемые в расчете сечения рассеяния электронов на молекулах и атомах водорода

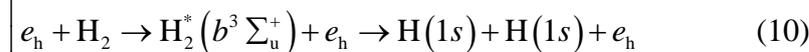
В источнике Пеннинга электроны образуются за счет ион-электронной эмиссии с катодов, а также за счет процессов ионизации в объеме источника. При этом в первом случае электроны успевают набрать достаточно большую энергию, ускоряясь в катодном слое, в то время как электроны, образовавшиеся за счет актов ионизации, остаются относительно холодными. Поэтому в данной работе рассматривается два «сорта» электронов: холодные, имеющие максвелловское распределение и температуру, и горячие, имеющие фиксированную энергию (моноэнергетические электроны).

Таким образом, кинетическая схема включает следующие кинетические процессы:

1) Кинетические процессы с участием максвелловских электронов (e_m):



2) Кинетические процессы с участием «горячих» электронов (e_h):



В данной работе считается, что у «холодных» электронов функция распределения максвелловская, а у «горячих» электронов – дельта-функция:

$$1. \quad e_m: f(\varepsilon) = 2 \sqrt{\frac{1}{\pi(kT_e)^3}} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{kT_e}\right), \quad \text{эВ}^{-3/2}$$

$$2. \quad e_h: f(\varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_h^3}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_h), \quad \text{эВ}^{-3/2}, \quad \varepsilon_h = 1 \text{ кэВ}$$

Функция распределения электронов по энергиям нормирована следующим условием:

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

Константы скорости рассчитываются как свертка сечений рассеяния с функцией распределения электронов по энергиям:

$$K^e = \gamma \int_0^{\infty} \varepsilon \sigma_n(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon, \quad \gamma = \sqrt{\frac{2e}{m_e}}$$

В соответствии с расчетами и оценками [33], [35] задавались следующие начальные данные:

- | | |
|--|---------------------------------|
| 1. $[e_m] = 10^{15} \text{ м}^{-3}$ | 4. $[H_2^+] = 0 \text{ м}^{-3}$ |
| 2. $[e_h] = 10^{14} \text{ м}^{-3}$ | 5. $[H] = 0 \text{ м}^{-3}$ |
| 3. $[H_2] = 3.0 \times 10^{19} \text{ м}^{-3}$ | 6. $[H^+] = 0 \text{ м}^{-3}$ |

Сравнение констант скорости различных механизмов диссоциации и ионизации для «горячих» и максвелловских электронов в зависимости от их температуры, а также зависимость концентраций различных частиц от времени приведены на рис.2–4. На графиках видно, что константы скорости ионизации и диссоциации за счет столкновений с «горячими» электронами значительно выше, чем за счет столкновений с холодными в диапазоне температуры электронов $T_e < 11$ эВ. При $T_e > 11$ эВ константы скорости процессов с участием холодных электронов становятся выше, чем для соответствующих процессов с участием «горячих», а значит, при данных температурах диссоциация и ионизация молекул будет происходить преимущественно за счет столкновений с максвелловскими (холодными) электронами. На рис. 9 также приведено сравнение констант диссоциации молекулярного водорода, рассчитанных в данной работе, и приведенных в работе [21].

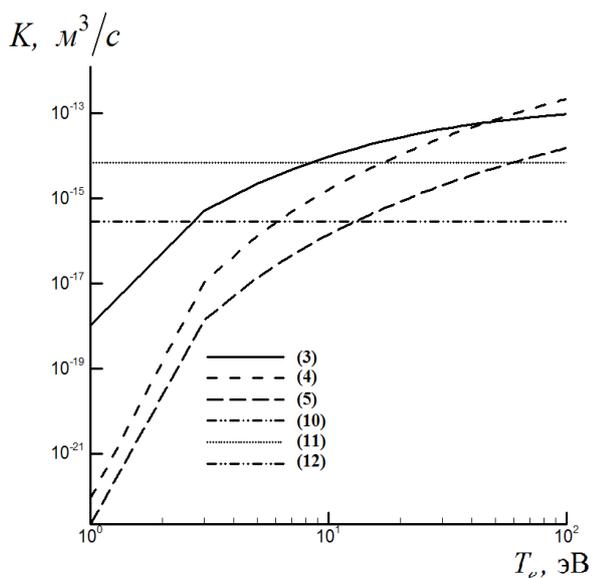


Рис. 2. Константы скорости различных механизмов диссоциации с участием «горячих» и максвелловских электронов. Номера кривых соответствуют номеру реакции в кинетической схеме

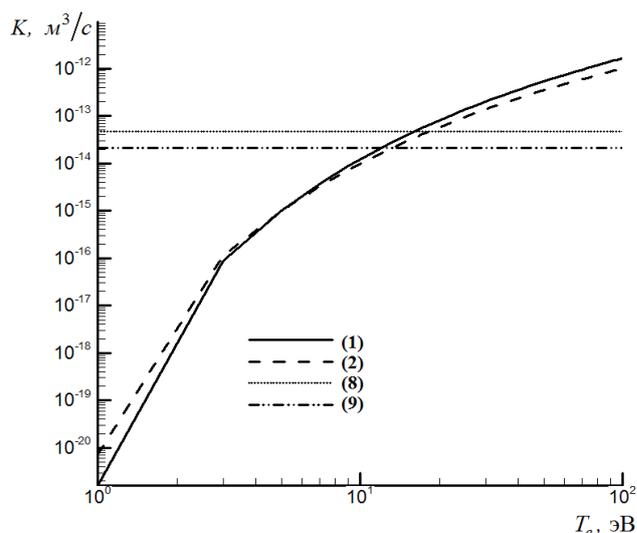


Рис. 3. Константы скорости ионизации молекулярного и атомарного водорода с участием «горячих» и максвелловских электронов. Номера кривых соответствуют номеру реакции в кинетической схеме

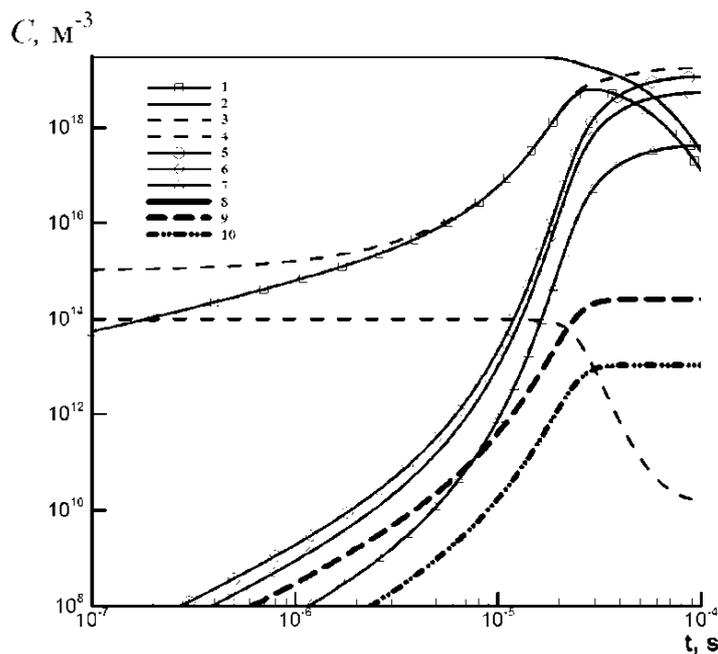


Рис. 4. Зависимость концентрации компонентов плазмы от времени (при $T_e = 15 \text{ eV}$):

- 1 – концентрации молекулярных ионов
- 2 – концентрации нейтральных молекул
- 3 – концентрации максвелловских электронов
- 4 – концентрации горячих электронов
- 5 – концентрация атомарных ионов, образовавшихся в реакции (3).
- 6 – концентрация атомарных ионов, образовавшихся в реакции (4).
- 7 – концентрация атомарных ионов, образовавшихся в реакции (5).
- 8 – концентрация атомарных ионов, образовавшихся в реакции (10)
- 9 – концентрация атомарных ионов, образовавшихся в реакции (11)

На рис. 5 и 6 приведены результаты по соотношению молекулярных и атомарных ионов (рис. 5), а также расчетные данные по степени диссоциации, ионизации плазмы молекулярного водорода (рис. 6). На рис. 5 видно, что в зависимости от температуры электронов соотношение $[H^+]/[H_2^+]$ изменяется в диапазоне $0.01 \div 30$. Относительная доля атомарных ионов, образовавшихся за счет столкновений с моноэнергетическими и максвелловскими электронами, а также влияние различных механизмов диссоциации на компонентный состав показано на рис. 7–8. Из рис. 7 видно, что при $T_e > 10$ эВ диссоциация молекулярного водорода происходит преимущественно за счет столкновений с максвелловскими электронами (более 90% образовавшихся атомарных ионов). На рис. 8 показано, что доминирующим механизмом диссоциации при $T_e < 25$ эВ является реакция (3). При повышении температуры доля этого механизма в образовании атомов водорода падает, а доля атомов образовавшихся в реакции (4) растет. Стоит также отметить, что доля атомов водорода, образовавшихся за счет процесса (5) составляет менее 5% (см. рис. 8).

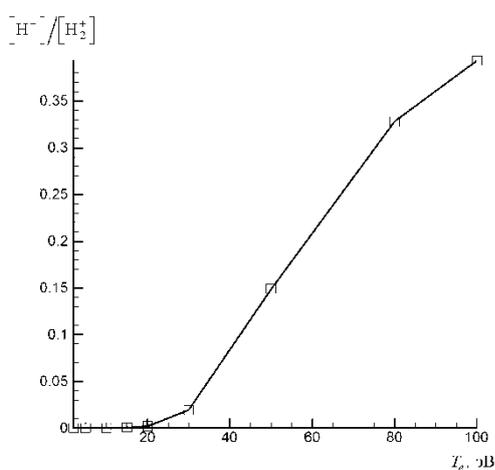


Рис. 5. Доля атомарных ионов(H^+) по отношению к молекулярным (H_2^+) в момент времени $t = 1.E-05$ с

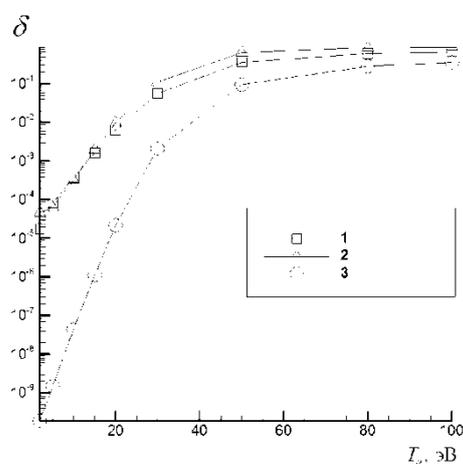


Рис. 6. Степень диссоциации (1) и степени ионизации (2 – H_2^+ , 3 – H^+) в момент времени $t = 1.E-05$ с

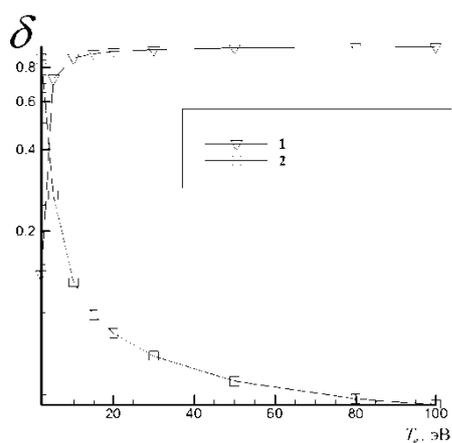


Рис. 7. Относительное количество атомарных ионов, образовавшихся за счет процессов диссоциации с участием максвелловских (1) и «горячих» (2) электронов в момент времени $t = 1.E-05$ с

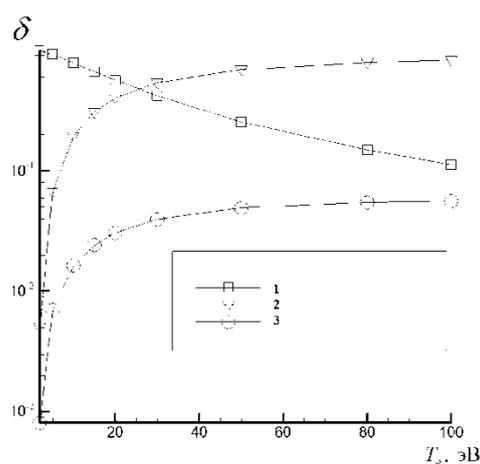


Рис. 8. Доля атомов, образовавшихся за счет различных механизмов диссоциации в момент времени $t = 1.E-05$ с: 1 – в реакции 3, 2 – в реакции 4, 3 – в реакции 5

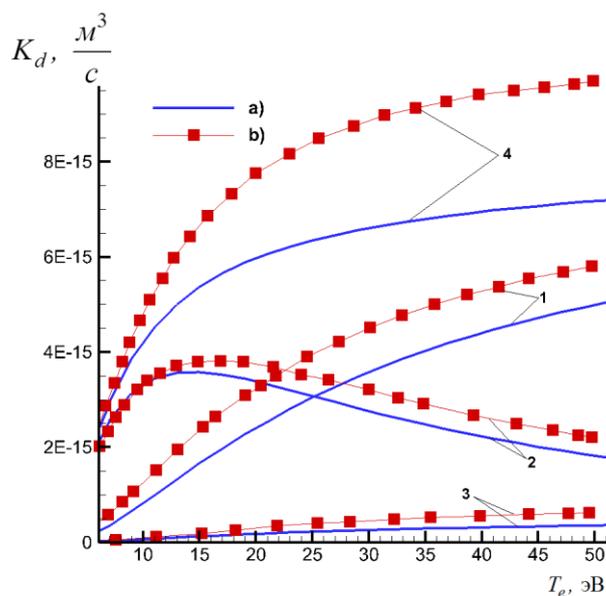


Рис. 9. Сравнение констант скоростей диссоциации рассчитанных в данной работе (а) и приведенных в работе [21] (b): 1 – константа скорости реакции (3); 2 – константа скорости реакции (4); 3 – константа скорости реакции (5); 4 – суммарная константа скорости диссоциации

Выводы

Данная работа отвечает направлению численного моделирования газодинамических энергетических установок, развиваемому в рамках научной программы лаборатории радиационной газовой динамики ИПМех РАН [36–40]. В работе приводится обзор работ по численному моделированию физико-химических процессов, протекающих в частично ионизованной плазме молекулярного водорода и его изотопов. Особое внимание уделяется кинетическим схемам, используемым в разных работах для расчета химического состава плазмы. Разработана кинетическая схема, описывающая кинетику ионизации и диссоциации водорода. Кинетическая схема включает процессы ионизации молекул и атомов электронным ударом, процессы рекомбинации, различные механизмы диссоциации молекул водорода электронным ударом, в представленной схеме учитываются два сорта образующихся в источнике Пеннинга электронов. Приводятся результаты численного моделирования кинетики ионизации и диссоциации молекулярного водорода в частично ионизованной плазме пеннинговского разряда, описываемой с использованием нуль-мерной кинетической модели. Требуется дальнейшее развитие кинетической модели в части учета неравновесных физико-химических процессов, протекающих в области горения пеннинговского разряда.

Литература

1. A. Laricchiuta, R. Celiberto, F. Esposito, and M. Capitelli, "State-to-state cross sections for H₂ and its isotopic variants," *Plasma Sources Sci. Technol.*, vol. 15, no. 2, pp. S62–S66, May 2006.
2. A. Laricchiuta, R. Celiberto, and R. Janev, "Electron-impact-induced allowed transitions between triplet states of H₂," *Phys. Rev. A*, vol. 69, no. 2, p. 022706, Feb. 2004.
3. R. Celiberto, R. K. Janev, A. Laricchiuta, M. Capitelli, J. M. Wadehra, and D. E. Atems, "Cross Section Data for Electron-Impact Inelastic Processes of Vibrationally Excited Molecules of Hydrogen and Its Isotopes," *At. Data Nucl. Data Tables*, vol. 77, no. 2, Pp. 161–213, Mar. 2001.
4. K. Sawada and T. Fujimoto, "Effective ionization and dissociation rate coefficients of molecular hydrogen in plasma," *J. Appl. Phys.*, vol. 78, no. 5, Pp. 2913–2924, 1995.
5. R. A. Stubbers, "Two-dimensional modelling of a radially-convergent cylindrical inertial electrostatic confinement (iec) fusion device," 1994.
6. J. Bretagne, G. Delouya, C. Gorse, M. Capitelli, and M. Bacal, "Electron energy distribution functions in electron-beam-sustained discharges: application to magnetic multicusp hydrogen discharges," *J. Phys. D. Appl. Phys.*, vol. 18, no. 5, Pp. 811–825, 1985.

7. U. Kortshagen and B. Heil, "Kinetic two-dimensional modeling of inductively coupled plasmas based on a hybrid kinetic approach," *Plasma Sci. IEEE Trans. ...*, vol. 27, no. 5, Pp. 1297–1309, 1999.
8. U. Kortshagen, A. Maresca, K. Orlov, and B. Heil, "Recent progress in the understanding of electron kinetics in low-pressure inductive plasmas," *Appl. Surf. Sci.*, vol. 192, no. 1, Pp. 244–257, 2002.
9. Matveyev A. A. and S. V. P., "Kinetic processes in a highly-ionized non-equilibrium hydrogen plasma," *Plasma Sources Sci. Technol.*, vol. 4, no. 4, Pp. 606–617, 1995.
10. R. Celiberto, A. Laricchiuta, M. Capitelli, R. K. Janev, J. M. Wadehra, and D. E. Atems, "Cross section data for electron-impact inelastic processes of vibrationally excited hydrogen molecules and their isotopes," 1999.
11. R. Celiberto and R. K. Janev, "Analytical representation of electron impact excitation cross sections of vibrationally excited H₂ and D₂ molecules," 1995.
12. C. Gorse, M. Capitelli, J. Bretagne, and M. Bacal, "Vibrational excitation and negative-ion production in magnetic multicusp hydrogen discharges," *Chem. Phys.*, vol. 93, no. 1, Pp. 1–12, 1985.
13. C. Gorse, M. Capitelli, M. Bacal, J. Bretagne, and A. Laganà, "Progress in the non-equilibrium vibrational kinetics of hydrogen in magnetic multicusp H⁻ ion sources," *Chem. Phys.*, vol. 117, no. 2, pp. 177–195, Oct. 1987.
14. R. Celiberto, M. Cacciatore, M. Capitelli, and C. Gorse, "Electron impact direct dissociation processes of vibrationally excited H₂ molecules to excited atomic hydrogen H^{*}(*n* = 1–5). I. Crosssections," *Chem. Phys.*, vol. 133, no. 3, Pp. 355–367, 1989.
15. M. Capitelli, I. Armenise, D. Bruno, M. Cacciatore, R. Celiberto, G. Colonna, O. De Pascale, P. Diomede, F. Esposito, C. Gorse, K. Hassouni, a Laricchiuta, S. Longo, D. Pagano, D. Pietanza, and M. Rutigliano, "Non-equilibrium plasma kinetics: a state-to-state approach," *Plasma Sources Sci. Technol.*, vol. 16, no. 1, Pp. S30–S44, Feb. 2007.
16. M. Capitelli, I. Armenise, E. Bisceglie, D. Bruno, R. Celiberto, G. Colonna, G. D'Ammando, O. De Pascale, F. Esposito, C. Gorse, V. Laporta, and a Laricchiuta, "Thermodynamics, Transport and Kinetics of Equilibrium and Non-Equilibrium Plasmas: A State-to-State Approach," *Plasma Chem. Plasma Process.*, vol. 32, no. 3, Pp. 427–450, Dec. 2011.
17. M. Capitelli, M. Cacciatore, R. Celiberto, O. De Pascale, P. Diomede, F. Esposito, a Gicquel, C. Gorse, K. Hassouni, a Laricchiuta, S. Longo, D. Pagano, and M. Rutigliano, "Vibrational kinetics, electron dynamics and elementary processes in H₂ and D₂ plasmas for negative ion production: modelling aspects," *Nucl. Fusion*, vol. 46, no. 6, Pp. S260–S274, Jun. 2006.
18. J. Loureiro and C. M. Ferreira, "Electron and vibrational kinetics in the hydrogen positive column," *J. Phys. D. Appl. Phys.*, vol. 22, no. 11, Pp. 1680–1691, 1989.
19. A. Girard, C. Lécot, and K. Serebrennikov, "Numerical simulation of the plasma of an electron cyclotron resonance ion source," *J. Comput. Phys.*, vol. 191, no. 1, Pp. 228–248, Oct. 2003.
20. N. Takado, J. Hanatani, T. Mizuno, a Hatayama, H. Tobar, M. Hanada, T. Inoue, M. Taniguchi, M. Dairaku, M. Kashiwagi, K. Watanabe, and K. Sakamoto, "Numerical Analysis of the Hydrogen Atom Density in a Negative Ion Source," *AIP Conf. Proc.*, vol. 925, no. 2007, Pp. 38–45, 2007.
21. N. Takado, H. Tobar, T. Inoue, J. Hanatani, a Hatayama, M. Hanada, M. Kashiwagi, and K. Sakamoto, "Numerical analysis of the production profile of H⁰ atoms and subsequent H⁻ ions in large negative ion sources," *J. Appl. Phys.*, vol. 103, no. 5, p. 053302, 2008.
22. R. Terasaki, I. Fujino, a Hatayama, T. Mizuno, and T. Inoue, "3D modeling of the electron energy distribution function in negative hydrogen ion sources," *Rev. Sci. Instrum.*, vol. 81, no. 2, p. 02A703, Feb. 2010.
23. G.J.M. Hagelaar, G. Fubiani, and J.-P. Boeuf, "Model of an inductively coupled negative ion source: I. General model description," *Plasma Sources Sci. Technol.*, vol. 20, no. 1, p. 015001, Feb. 2011.
24. J.P. Boeuf, G.J.M. Hagelaar, P.Sarrailh, G.Fubiani, and N. Kohen, "Model of an inductively coupled negative ion source: II. Application to an ITER type source," *Plasma Sources Sci. Technol.*, vol. 20, no. 1, p. 015002, Feb. 2011.
25. I. Méndez, G.-V. F. J., V. J. Herrero, and I. Tanarro, "Atom and Ion Chemistry in Low Pressure Hydrogen DC Plasmas," *J. Phys. Chem. A*, vol. 110, no. 18, Pp. 6060–6066, 2006.
26. F. Taccogna, R. Schneider, S. Longo, and M. Capitelli, "Modeling of a negative ion source. I. Gas kinetics and dynamics in the expansion region," *Phys. Plasmas*, vol. 14, no. 7, p. 073503, 2007.
27. F. Taccogna, R. Schneider, S. Longo, and M. Capitelli, "Modeling of a negative ion source. II. Plasma-gas coupling in the extraction region," *Phys. Plasmas*, vol. 15, no. 10, p. 103502, 2008.

28. O. Fukumasa, S. Mori, N. Nakada, Y. Tauchi, M. Hamabe, K. Tsumori, and Y. Takeiri, "Isotope Effect of H–D– Volume Production in Low-Pressure H₂/D₂ Plasmas– Measurement of VUV Emissions and Negative Ion Densities," *Contrib. to Plasma Phys.*, vol. 44, no. 5–6, Pp. 516–522, Sep. 2004.
29. M. Bacal, A. Hatayama, and J. Peters, "Volume production negative hydrogen ion sources," *IEEE Trans. Plasma Sci.*, vol. 33, no. 6, pp. 1845–1871, Dec. 2005.
30. K. G. Tschersich, "Intensity of a source of atomic hydrogen based on a hot capillary," *J. Appl. Phys.*, vol. 87, no. 5, P. 2565, 2000.
31. M. Bacal, "Physics aspects of negative ion sources," *Nucl. Fusion*, vol. 46, no. 6, pp. S250–S259, Jun. 2006.
32. F. Taccogna, P. Minelli, S. Longo, M. Capitelli, and R. Schneider, "Modeling of a negative ion source. III. Two-dimensional structure of the extraction region," *Phys. Plasmas*, vol. 17, no. 6, P. 063502, Jun. 2010.
33. Гончаров А.А., Добровольский А.Н., Евсюков А.Н., Проценко И.М., Литовко И.В. "Плазменно-динамические особенности цилиндрических газовых разрядов магнетронного типа" // Вопросы атомной науки и техники. Серия «Плазменная электроника и новые методы ускорения». 2008, № 4, С. 189–194.
34. Электронная база данных сечений рассеяния: "<http://www.lxcat.laplace.univ-tlse.fr/>."
35. Goncharov O.A., Dobrovolskyi A.M., Evsyukov A.M., Protsenko I.M., Litovko I.V. «New vision of the physics of gas magnetron-type discharges» // *Ukr. J. Phys.* 2009, V.54, № 1–2, Pp.63–67.
36. Сторожев Д.А. "Численное моделирование кинетики ионизации и диссоциации водорода в плазме разряда Пеннинга в приближении ЛТР" // Физико-химическая кинетика в газовой динамике, 2014, Том 15, Вып. 3, <http://chemphys.edu.ru/pdf/2014-10-02-008.pdf>
37. Сторожев Д.А. «Кинетические процессы в плазме тлеющего разряда» // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2013. Т.14. Вып.3. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2013-10-12-007.pdf>
38. Surzhikov S.T. *Computational Physics of Electric Discharges in Gas Flows*. Walter de Gruyter GmbH, Berlin/Boston. 2013. 428 p.
39. Storozhev D.A., Surzhikov S.T., "Numerical Simulation of Two-Dimensional Structure of Glow Discharge in view of vibrational kinetics", *AIAA paper, Plasma Discharge Modeling*, January 16, 2014, 10.2514/6. 2014–1193.
40. Seleznev R.K. and Surzhikov S.T. A Generalized Newton Method for Differential Equation of Chemical Kinetics// *AIAA 2013-3009*. 44th AIAA Thermophysics Conference, June 24-27, 2013, San Diego, CA. 17 p.
41. Горбунов А.А., Селезнев Р.К. Моделирование горения водорода в канале модельного ГПВРД. //Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2013, Том 14, Вып. 4. <http://chemphys.edu.ru/pdf/2013-12-20-001.pdf>
42. Селезнев Р.К. Исследование обобщенного метода Ньютона для решения системы дифференциальных уравнений химической кинетики на примере горения углеводорода в кислороде //Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2013, Том 14, Вып. 4. <http://chemphys.edu.ru/pdf/2013-12-20-010.pdf>
43. Полежаев Ю.В., Селезнев Р.К. Численное исследование процессов возникновения резонанса в экспериментальной установке импульсно-детонационного двигателя// *ТВТ*// 2014, Том 52, Выпуск. 2, С. 226–230.
44. Жорник К.А., Селезнев Р.К. Расчет интегральных характеристик силовых установок ПВРД //Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2014, Том 15, Вып. 2. <http://chemphys.edu.ru/pdf/2014-11-28-006.pdf>
45. Селезнев Р.К. На пути к гиперзвуку. Краткий исторический обзор. //Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2014, Том 15, Вып. 3. <http://chemphys.edu.ru/pdf/2014-10-02-007.pdf>
46. Surzhikov S. et al. Unsteady Thermo-Gasdynamic Processes in Scramjet Combustion Chamber with Periodical Input of Cold Air // *50th AIAA/ASME/SAE/ASEE Jt. Propuls. Conf. Reston, Virginia: American Institute of Aeronautics and Astronautics*, 2014. Pp. 1–25.

Статья поступила в редакцию 20 ноября 2014 г.