УДК 533.72

ВЛИЯНИЕ СТЕПЕНИ ДИССОЦИАЦИИ КИСЛОРОДА НА КИНЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЭЛЕКТРОНОВ В ВОЗДУШНОМ РАЗРЯДЕ

Ю.Ф. Колесниченко, Д.В. Хмара

Объединенный Институт Высоких Температур РАН, Москва

dkhmara@list.ru

Аннотация

На основе численного решения уравнения Больцмана для энергии электронов в воздухе с различными степенями диссоциации O_2 получены зависимости констант скорости электронно-столкновительных процессов, которые выражаются в простом и удобном для проведения кинетических расчетов виде поправочного множителя к константам $K_{X=0}$ при нулевой диссоциации O_2 $K(E/N, X) = K_{X=0}(E/N) \times \gamma(E/N, X)$, где γ поправочный коэффициент, учитывающий степень диссоциации X кислорода. Показано, что с увеличением энергетического порога влияние диссоциации возрастает и для процессов ионизации может приводить к увеличению K_X на порядок и более величины.

THE INFLUENCE OF OXYGEN DEGREE OF DISSOCIATION ON KINETIC CHARACTERISTICS OF ELECTRONS IN AIR DISCHARGE

Based on solving of Boltzmann equation for energy of electrons in air at various degree of O₂ dissociation the dependences of electron collision rate constants were obtained. Rate constants are expressed in simple and handy form for kinetic calculations as a fudge factor for rate constants $K_{X=0}$ for zero degree of O₂ dissociation: $K(E/N, X) = K_{X=0}(E/N) \times \gamma(E/N, X)$, where γ is the factor, which depends on degree of oxygen dissociation. It was shown that during increasing of reaction energy threshold the significance of dissociation influence increases too and for the processes of ionization K_X can increase up to order of value and bigger.

При исследовании плазменной кинетики газового разряда в воздухе необходимо принимать во внимание меняющееся соотношение основных компонентов среды. Так, с увеличением энерговклада в газоразрядную плазму, растет степень диссоциации кислорода и состав среды непрерывно меняется от $N_2/O_2/O = 0.78/0.22/0.0$ вплоть до 0.64/0.0/0.36, что

соответствует изменению степени диссоциации $X = I - \frac{[O_2]}{[O_2]_0}$ от 0 до 1 ([O_2]_0 и [O_2] -

исходная и текущая концентрация кислорода). Такое изменение состава влияет на энергетический спектр электронов и, как следствие, на их дрейфовые и кинетические характеристики (константы скорости) столкновительных процессов электронов со всеми компонентами газовой смеси.

Цель предпринятой работы состоит в выяснении степени такого влияния и в получении параметрических выражений, позволяющих учесть зависимости от *X* констант скорости электронно-столкновительных процессов (колебательного, электронного возбуждения, диссоциации, ионизации, прилипания) и других характеристик электронов при проведении кинетических расчетов.

Поставленная задача решалась на основе численного расчета функции распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ) в воздухе при вариации степени диссоциации О₂. Расчет ФРЭЭ состоял в численном решении уравнения Больцмана для энергии электронов в

приведенном электрическом поле E/N. Уравнение Больцмана решалось в общепринятом "двучленном приближении" при разложении ФРЭЭ f(u) по сферическим гармоникам (полиномам Лежандра):

$$\frac{E^{2}}{3} \times \frac{u}{\sum_{k} N_{k} \times \sigma_{m,k}(u)} \times \frac{df(u)}{du} + \sum_{k} \frac{2m_{e}}{M_{k}} \times N_{k} \times u^{2} \times \sigma_{m,k}(u) \times \left[f(u) + \frac{kT_{g}}{e} \times \frac{df(u)}{du}\right] + \sum_{k} N_{k} \times B_{k} \times \varepsilon \times \sigma_{rot,k}(u) \times \left[f(u) + \frac{kT_{g}}{e} \times \frac{df(u)}{du}\right] = -\sum_{k} N_{k} \times \sum_{ij} \int_{u}^{u+\varepsilon_{ij}} \sigma_{ij,k}(u') \times u' \times f(u') \times du'$$

$$(1)$$

с нормировкой: $\int_{0}^{\infty} f(u) \times \sqrt{u} \times du = 1$. Индекс k означает сорт частиц N₂, O₂ или O; *e*, *m_e*, *M_k*-

соответственно: заряд, масса электрона и нейтральной частицы сорта k; T_g , E, N_k и B_k – газовая температура, напряженность электрического поля, концентрация частиц и вращательная постоянная молекул; σ_m и σ_{rot} – транспортное сечение рассеяния электронов и сечение вращательного возбуждения молекул электронным ударом; σ_{ij} – сечения неупругих столкновений электрон - нейтрал с переходом нейтральной частицы из состояния і в состояние *j* с энергетическим порогом ε_{ij} (колебательное и электронное возбуждение, ионизация, диссоциация).

Первое слагаемое правой части уравнения (1) отвечает набору электроном энергии в приложенном поле E, второе и третье – потерям энергии в упругих столкновениях и при вращательном возбуждении молекул в приближении диффузного "дрейфа" электронов вдоль "энергетической оси". Правая часть уравнения описывает потери энергии, связанные с неупругими столкновениями электронов с нейтральными частицами, в которых электроны теряют энергию, равную энергии перехода частиц в возбужденное состояние ε_{ij} .

Уравнение (1), преобразованное к виду

$$\ln f(u) = -\int_{0}^{\infty} \left(1 + \frac{\sum_{k} N_{k} \cdot \sum_{i,j} \int_{u'}^{u'+\varepsilon_{ij}} \frac{z \cdot f(z) \cdot \sigma_{ij,k}(z)}{u' \cdot f(u')} \cdot dz}{u' \cdot f(u')} \right) \times \left(\frac{kT_{g}}{e} + \frac{E^{2}}{3 \cdot \sum_{k} N_{k} \cdot \sigma_{m,k}(u') \cdot u' \cdot \sum_{k} N_{k} \cdot \left[\frac{2m_{e}}{M_{k}} \cdot u' \cdot \sigma_{m,k}(u') + B_{k} \cdot \sigma_{rot,k}(u') \right]}{\frac{1}{2}} \right)^{-1} du'$$

решалось методом простых итераций [1] с использованием программного пакета, описанного в [2]. Расчеты проводились в интервале энергий электронов u = 0.60 эВ с шагом интегрирования 0.02 эВ для диапазона степени диссоциации $O_2 X = 0.1$ и приведенных полей E/N = 60.200 Td. Расчет прекращался при достижении относительной погрешности ФРЭЭ по сравнению с предыдущей итерацией менее 0.01%. В начальном приближении ФРЭЭ рассчитывалась в соответствии с [3].

Литературные ссылки на электронно - столкновительные сечения для различных веществ сведены в табл. 1.

Тип возбуждений	N ₂	O ₂	0	N
Упругие столкновения	[<u>4]</u>	[<u>16</u>]	[<u>27</u>]	[<u>27]</u>
вращательные	[<u>4</u>]	[<u>17</u>]	-	-
колебательные	$[\underline{5},\underline{6},\underline{7}]^1$	$[\underline{18},\underline{19}]^3$	-	-
электронные	$[\underline{9}, \underline{10}]^2$	[<u>4</u> , <u>19</u> , <u>22</u>]	[<u>28</u>]	[<u>29</u> , <u>30</u>]
диссоциация	[<u>11</u> , <u>12</u>]	[<u>4</u> , <u>19</u> , <u>20</u> , <u>22</u>]	-	-
ионизация	[<u>13</u> , <u>14</u> , <u>15</u>]	[<u>14</u> , <u>24</u>]	[<u>35</u>]	[<u>31</u>]
прилипание	-	[<u>25</u> , <u>26</u>]	-	_
¹ перенормированы в соответствии с [8] ² сечения [9] перенормированы в соответствии с [4] ³ сечения для $u < 3$ эВ [18] перенормированы в соответствии с [20], для резонанса при ≈ 9.5 эВ – в соответствии с [21]				

Литературные источники сечений электронно-столкновительных процессов, взятых при расчетах

По результатам расчетов ФРЭЭ определялись константы скорости процессов:

$$K_{ij} = \sqrt{\frac{2}{m_e}} \times \int_0^\infty \sigma_{ij}(u) \times f(u) \times u \times du ,$$

а так же другие интегральные характеристики электронов, такие как дрейфовая скорость

$$V_{dr} = \frac{1}{3} \times \sqrt{\frac{2e}{m_e} \times \frac{E}{N} \times \int_0^\infty \frac{u}{\sigma_m(u)} \times \left(\frac{df(u)}{du}\right) \times du},$$

средняя температура

$$T_e = \frac{2}{3} \times \int_0^\infty f(u) \times \sqrt{u} \times du$$
⁽²⁾

и т.н. характеристическая температура электронов – отношение коэффициента поперечной диффузии к подвижности электронов

$$T_{ch} = \frac{D_T}{\mu} = \frac{\int_0^\infty \frac{u}{\sigma_m(u)} \times f(u) \times du}{\int_0^\infty \frac{u}{\sigma_m(u)} \times \left(\frac{df(u)}{du}\right) \times du}.$$
(3)

На рис.1 показаны зависимости коэффициента ионизации дрейфовой скорости и характеристической температуры электронов при разных степенях диссоциации О₂. Зависимости приведены в сравнении с данными измерений соответствующих величин, которые были взяты из [<u>32</u>, <u>33</u>] для V_{dr} и из [<u>32</u>] для T_{ch} и α/N . Расчетный коэффициент

ионизации определялся как $\alpha / N = \frac{\sum_{i} K_i \times \eta_i}{V_{dr}}$, где K_i – константа скорости ионизации, η_i –

удельное содержание компонента ($i = N_2$, O₂, O). Сравнение α/N с экспериментом ограничено снизу уровнями $E/N \approx 120 - 130$ Тд, выше которых α/N многократно превышает коэффициент прилипания к кислороду η/N (данные из [32] показаны на рисунке косыми крестиками) и, следовательно, все процессы, связанные с образованием отрицательных ионов (перезарядка ионов, ион - ионная рекомбинация) пренебрежимы по сравнению с прямой ионизацией.



Рис.1. Коэффициент ионизации α/N , коэффициент прилипания к кислороду η/N , характеристическая температура T_{ch} и дрейфовая скорость V_{dr} электронов в зависимости от E/N при разных степенях диссоциации O₂

Из рисунка видно, что дрейфовая скорость слабо зависит от степени диссоциации, а ее изменение в зависимости от X укладывается в разброс имеющихся экспериментальных данных для этого показателя. Этот факт говорит о том, что скорость энерговклада в разрядную плазму во времени

$$\mathcal{E}(\tau) = j \times E = e \times E \times V_{dr} \times \int_{0}^{\tau} n_{e}(t) \times dt$$

не зависит от степени диссоциации, а зависит только от скорости наработки электронной концентрации.

Более сильная зависимость – до порядка величины при малых *E*/*N* - имеет место для коэффициента ионизации.

Анализ результатов расчета констант скорости индивидуальных процессов показал, что влияние степени диссоциации кислорода можно учесть, введя двухпараметрический поправочный множитель γ к константе скорости процесса при нулевой степени диссоциации $K_{X=0}$

$$K(E/N, X) = K_{X=0}(E/N) \times \gamma(E/N, X).$$
⁽⁴⁾

На рис.2 и 3 приведены примеры зависимостей $\gamma(X)$ при различных *E/N* (*N* – полное число частиц) для высоко-, средне- и низко - пороговых возбуждений.



Рис.2. Поправочный множитель для молекулярной ионизации N₂ и возбуждения состояния N₂($A^{3}\Sigma_{u}^{+}$) в зависимости от степени диссоциации O₂: **1** - *E*/N = 60, **2** - 80, **3** - 100, **4** - 140, **5** - 200 Тд

Видно, что влияние степени диссоциации на скорость процесса тем выше, чем выше порог процесса и ниже E/N. Так, для молекулярной ионизации азота воздуха ($E_{thresh} \approx 15.6 \text{ pB}$) увеличение константы скорости при X = 1 составляет 20 раз при E/N = 60 Tд, для возбуждения первого триплетного состояния азота (≈ 6.2 эВ) – 3 раза, восьмого колебательного уровня N₂ (2.35 эВ) – 2 раза. Такая закономерность объясняется уменьшением удельного содержания N₂ при увеличении степени диссоциации O₂, и, как следствие, уменьшением доли низкоэнергетических потерь электронов на колебательных резонансах N₂ (2-3 эВ) в общей совокупности потерь в неупругих столкновениях. Выражается это в том, что возрастает доля высокоэнергетических электронов, т.е. характер ФРЭЭ приближается к максвелловскому энергетическому распределению. Сказанное иллюстрирует врезка на рис.2, где показана зависимость от *E/N* отношения температуры электронов (2) к их характеристической температуре (3) для разных Х. Как известно, в случае распределения Максвелла, эти величины совпадают.



Рис.3. Поправочный множитель для возбуждения колебательных уровней N_2 в зависимости от степени диссоциации O_2 : **1** - E/N = 60, **2** - 80, **3** - 100, **4** - 140, **5** - 200 Тд

Для использования полученных результатов в практических расчетах был выбран способ интерполяции для поправочного множителя *у*. Наилучшей зависимостью, дающей погрешность в пределах 5%, оказалась зависимость вида:

$$\gamma(E/N, X) = \exp\left[\alpha \times X + \frac{(E/N)^*}{E/N} \times X\right],$$
(5)

где α и $(E/N)^*$ - подгоночные коэффициенты, в то время как зависимость $K_{X=0}(E/N)$ интерполируется обобщенной формулой Аррениуса с приведенным полем в качестве аргумента [<u>34</u>]:

$$K_{X=0}(E/N) = A \times (E/N)^n \times exp\left[-\frac{(E/N)_0}{E/N}\right],$$
(6)

A, n и $(E/N)_0$ - подгоночные коэффициенты.

Результаты расчетов сведены в таблицы 2 и 3, где даны коэффициенты интерполяций для (5) и (6), соответственно. В таблицах также даны коэффициенты для некоторых возбуждений атомарного азота. Эти результаты получены при интегрировании сечений соответствующих процессов с полученными в расчетах ФРЭЭ, что накладывает ограничение на степень диссоциации N_2 - удельное содержание атомов N должно быть мало настолько, чтобы не влиять на энергетический спектр электронов.

Подгоночные коэффициенты для зависимости (5) множителя $\gamma(E/N, X)$ в выражении (4)

реакция	α	<i>(Е/N)*</i> , Тд		
азот				
колебательное возбуждение				
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[v=1]$	-0.270	27.8		
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[v=2]$	-0.323	33.9		
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[v=3]$	-0.341	36.2		
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[v=4]$	-0.363	43.0		
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[v=5]$	-0.392	46.8		
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[v=6]$	-0.409	55.7		
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[v=7]$	-0.423	62.3		
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[v=8]$	-0.440	68.2		
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[v=9]$	-0.421	70.8		
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[v=10]$	-0.409	72.4		
возбуждение электрон	ных состо	ояний		
$e+N_2\rightarrow e+N_2[A^3\Sigma_u^+]$	0.052	67.1		
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[B^3\Pi_g]$	-0.032	79.8		
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[W^3\Delta_u]$	0.098	76.2		
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[B'^3\Sigma_u^-]$	0.035	87.0		
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[a'^1\Sigma_u]$	0.022	89.3		
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[a^1\Pi_g]$	0.120	84.9		
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[w^1\Delta_u]$	-0.023	96.6		
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[C^3\Pi_u]$	-0.033	130.0		
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[E^3\Sigma_g^+]$	0.155	122.3		
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[a''^1\Sigma_g]$	0.118	132.1		
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[Ry]$	0.228	138.4		
$e+N_2^+[X^2\Sigma_g^+] \rightarrow e+N_2^+[B^2\Sigma_u^+]$	-0.187	62.6		

Продолжение

реакция	α	<i>(Е/N)*</i> , Тд		
кислород				
колебательное возбуждение				
$e+O_2 \rightarrow e+O_2[v=1]$	0.233	-5.7		
$e+O_2 \rightarrow e+O_2[v=2]$	0.234	-3.6		
$e+O_2 \rightarrow e+O_2[v=3]$	0.248	2.2		
$e+O_2 \rightarrow e+O_2[v=4]$	0.219	8.4		
возбуждение электронн	ых состо:	яний		
$e+O_2 \rightarrow e+O_2[a^1\Delta_g]$	-0.048	41.8		
$e+O_2 \rightarrow e+O_2[b^1\Sigma_g^+]$	-0.109	50.9		
$e+O_2 \rightarrow e+O_2[A^3\Sigma_u^+]$	-0.191	68.2		
$e+O_2 \rightarrow e+O_2[B^3\Sigma_u^+]$	-0.101	68.8		
диссоциаци	я			
$e+O_2 \rightarrow e+O+O$	0.249	76.4		
$e+O_2 \rightarrow e+O[^1D]+O[^1D]$	-0.002	82.3		
$e+O_2 \rightarrow e+O[^1D]+O[^1S]$	0.197	162.3		
$e+O_2 \rightarrow e+O+O[^1S]$	0.226	90.8		
ионизация	[
$e+O_2 \rightarrow e+e+O_2^+$	0.291	120.8		
$e+O_2 \rightarrow e+e+O^++O$	0.296	219.3		
$e+O_2 \rightarrow e+O^++O^-$	0.247	198.3		
прилипание				
$e+O_2 \rightarrow O^-+O$	-0.279	67.3		
$e+O_2[a^1\Delta_g] \rightarrow O^-+O$	-0.342	68.2		
$e+O_2[b^1\Sigma_g^+] \rightarrow O^-+O$	-0.372	70.0		
ионизация				
$e+N_2 \rightarrow e+e+N_2^+$	0.214	179.1		
$e+N_2[A^3\Sigma_u^+] \rightarrow e+e+N_2^+$	0.256	93.1		

Продолжение

реакция	α	<i>(Е/N)*</i> , Тд	
атомарный кислород			
возбуждение электронных состояний			
$e+O\rightarrow e+O[^{1}D]$	-0.166	59.3	
$e+O\rightarrow e+O[^{1}S]$	-0.087	60.8	
$e+O\rightarrow e+O[^{5}P]$	0.022	114.9	
ионизация			
$e+O\rightarrow e+e+O^+$	0.143	150.8	
атомарный азот			
возбуждение электронн	ых состоя	яний	
$e+N\rightarrow e+N[^{2}D]$	-0.179	60.7	
$e+N\rightarrow e+N[^{2}P]$	-0.123	61.7	
$e+N[^{2}D]\rightarrow e+N[^{2}P]$	-0.150	61.9	
ионизация			
e+N→e+e+N ⁺	0.218	165.2	
$e+N[^{2}D]\rightarrow e+e+N^{+}$	0.164	126.2	
$e+N[^{2}P]\rightarrow e+e+N^{+}$	0.168	108.9	

-		-	
Реакция	A	n	<i>(Е/N)</i> , Тд
азот			
колебател	ьное возбужде	ние	
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[v=1]$	4.81·10 ⁻⁶	-1.219	136.0
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[v=2]$	1.13·10 ⁻⁵	-1.476	162.9
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[v=3]$	$1.42 \cdot 10^{-5}$	-1.578	174.8
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[v=4]$	$2.27 \cdot 10^{-5}$	-1.717	211.1
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[v=5]$	$2.28 \cdot 10^{-5}$	-1.731	229.2
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[v=6]$	6.53·10 ⁻⁵	-1.920	278.6
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[v=7]$	6.67·10 ⁻⁵	-2.014	314.6
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[v=8]$	6.32·10 ⁻⁵	-2.125	348.1
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[v=9]$	2.83·10 ⁻⁵	-2.186	377.6
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[v=10]$	1.80·10 ⁻⁵	-2.243	395.2
возбуждение	электронных со	стояний	
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[A^3\Sigma_u^+]$	1.78·10 ⁻⁷	-0.678	412.6
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[B^3\Pi_g]$	8.70·10 ⁻⁷	-0.928	456.0
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[W^3\Delta_u]$	4.48·10 ⁻⁸	-0.429	435.5
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[B'^3\Sigma_u]$	3.36·10 ⁻⁸	-0.565	471.4
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[a'^1\Sigma_u]$	4.25·10 ⁻⁸	-0.639	480.6
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[a^1\Pi_g]$	1.80·10 ⁻⁸	-0.315	464.6
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[w^1\Delta_u]$	$2.18 \cdot 10^{-7}$	-0.875	511.1
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[C^3\Pi_u]$	$1.04 \cdot 10^{-6}$	-0.819	636.2
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[E^3\Sigma_g^+]$	5.52·10 ⁻¹¹	0.017	598.8
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[a''^1\Sigma_g]$	7.36.10-10	-0.052	633.9
$e+N_2 \rightarrow e+N_2[Ry]$	$1.08 \cdot 10^{-9}$	0.387	664.3
$e+N_2^+[X^2\Sigma_g^+] \rightarrow e+N_2^+[B^2\Sigma_u^+]$	8.67.10-4	-1.668	393.6

Подгоночные коэффициенты для зависимости (6) константы скорости $K_{X=0}(E/N)$ электронно - столкновительных реакций в выражении (4)

Продолжение	
-------------	--

Реакция	A	n	<i>(Е/N)</i> , Тд
	Ионизация		
$e+N_2[A^3\Sigma_u^+] \rightarrow e+e+N_2^+$	1.41.10-9	0.334	483.9
$e+N_2 \rightarrow e+e+N_2^+$	9.95·10 ⁻¹⁰	0.347	858.4
	Кислород		
колебат	гельное возбужде	ение	
$e+O_2 \rightarrow e+O_2[v=1]$	4.80·10 ⁻¹³	1.504	-24.3
$e+O_2 \rightarrow e+O_2[v=2]$	1.39·10 ⁻¹³	1.575	-39.2
$e+O_2 \rightarrow e+O_2[v=3]$	8.23·10 ⁻¹⁴	1.593	-4.6
$e+O_2 \rightarrow e+O_2[v=4]$	3.34·10 ⁻¹²	0.888	109.9
возбуждени	е электронных со	остояний	
$e+O_2 \rightarrow e+O_2[a^1\Delta_g]$	8.69.10-8	-0.650	259.5
$e+O_2 \rightarrow e+O_2[b^1\Sigma_g^+]$	2.20·10 ⁻⁷	-1.053	316.0
$e+O_2 \rightarrow e+O_2[A^3\Sigma_u^+]$	2.23.10-5	-1.629	422.0
$e+O_2 \rightarrow e+O_2[B^3\Sigma_u^+]$	1.15.10-5	-1.346	427.2
	Диссоциация		
e+O ₂ →e+O+O	4.02.10-6	-1.182	405.5
$e+O_2 \rightarrow e+O[^1D]+O[^1D]$	3.97·10 ⁻⁶	-0.921	469.5
$e+O_2 \rightarrow e+O+O[^1S]$	8.63·10 ⁻¹¹	0.068	486.1
$e+O_2 \rightarrow e+O[^1D]+O[^1S]$	4.07·10 ⁻¹¹	0.223	779.3
Ионизация			
$e+O_2 \rightarrow e+e+O_2^+$	8.31·10 ⁻¹¹	0.647	592.9
$e+O_2 \rightarrow e+O^++O^-$	9.28·10 ⁻¹³	0.616	946.0
$e+O_2 \rightarrow e+e+O^++O$	1.84·10 ⁻¹¹	0.633	1071.5
Прилипание			
$e+O_2[b^1\Sigma_g^+]\rightarrow O^-+O$	1.34E·10 ⁻⁴	-2.173	408.6
$e+O_2[a^1\Delta_g]\rightarrow O^-+O$	5.10·10 ⁻⁵	-2.115	412.2
$e+O_2 \rightarrow O^-+O$	9.27·10 ⁻⁶	-1.968	420.2

Реакция	A	п	<i>(Е/N)</i> , Тд	
ато	марный кислоро	Эд		
возбуждени	возбуждение электронных состояний			
$e+O\rightarrow e+O[^{1}D]$	1.84.10-5	-1.346	358.1	
$e+O\rightarrow e+O[^{1}S]$	5.94·10 ⁻⁷	-1.116	379.5	
$e+O\rightarrow e+O[^{5}P]$	5.63·10 ⁻⁹	-0.435	553.7	
	Ионизация			
$e+O\rightarrow e+e+O^+$	2.98·10 ⁻¹⁰	0.450	709.3	
a	атомарный азот			
возбуждени	ие электронных с	остояний		
$e+N\rightarrow e+N[^{2}D]$	5.79·10 ⁻⁵	-1.378	363.6	
$e+N\rightarrow e+N[^{2}P]$	8.94·10 ⁻⁶	-1.265	382.1	
$e+N[^{2}D]\rightarrow e+N[^{2}P]$	3.01.10-5	-1.338	380.8	
Ионизация				
$e+N\rightarrow e+e+N^+$	1.08.10-10	0.636	752.2	
$e+N[^{2}D]\rightarrow e+e+N^{+}$	2.81·10 ⁻⁹	0.244	590.1	
$e+N[^{2}P]\rightarrow e+e+N^{+}$	2.91·10 ⁻⁹	0.178	524.1	

Продолжение

Заключение

На основании проведенных расчетов ФРЭЭ в воздухе с различными степенями диссоциации кислорода получены значения констант скорости электронностолкновительных процессов для интервала приведенных полей E/N = 60 - 200 Td и степени диссоциации $O_2 X = 0 - 1$. Результаты расчетов показали, что рост диссоциации больше всего ускоряет процессы с высоким энергетическим порогом, что обусловлено приближением характера ФРЭЭ к энергетическому распределению Максвелла.

По результатам расчетов получены простые зависимости констант скорости как функции E/N и X. Зависимости одинаково справедливы как для изобарических условий разряда, так и для неизобарических. Во втором случае необходимо принимать во внимание соответствующее снижение приведенного поля E/N по мере диссоциации кислорода из-за увеличения плотности среды N.

Литература

- 1. Осипов А.П., Рахимов А.Е. Об одной ионизационной неустойчивости в плазме несамостоятельных разрядов // ФП, 1977, Т.3, №3, С.644-651.
- Khmara D.V., Kolesnichenko Yu.F. Software package for kinetic and spectra emission modeling of gas discharge plasma // Proc. VI Workshop (Intern.) on Microwave Discharges: Fundamentals and Applications, Zvenigorod, ISTC, 2006, P.129-132.
- 3. Дынникова Г.Я. Приближенное решение уравнения Больцмана для ФРЭЭ в слабоионизованной плазме в постоянном электрическом поле // ПМТФ, 1988, №5, С.3-9.

- 4. Morgan W.L. Electron Collision Data for Plasma Chemistry Modeling // Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics, Vol.43, P.79-110.
- Schulz G.J. Vibrational Excitation of N₂, CO, and H₂ by Electron Impact // Phys. Rev., 1964, Vol.135, №3, P.988-994.
- Engelhardt A.G., Phelps A.V., Risk S.R. Determination of Momentum Transfer and Inelastic Collision Cross Sections for Electrons in Nitrogen Using Transport Coefficients // Phys. Rev., 1964, Vol.135, №6A, P.1566-1573.
- Boness M.J.W., Schulz G.J. Excitation of High Vibrational States of N₂ and CO via Shape Resonances // Phys. Rev. A, 1973. Vol.8, №6, P.2883-2886.
- 8. Гордеев О.А., Хмара Д.В. Влияние нормировки сечений возбуждения колебаний молекул на макроскопические характеристики разряда в азоте // ТВТ, 1991, 32, №1, С.133-134.
- Cartwright D.C., Trajmar S., Chutjian A., Williams. W. Electron impact excitation of the electronic states of N₂. II. Integral cross sections at incident energies from 10 to 50 eV // Phys. Rev. A, 1977, Vol.16, №3, P.1041-1051.
- Orel A.E. Theoretical study of electron-impact excitation of N₂ // Phys. Rev. A, 1990, Vol.42, №9, P.5292-5297.
- Spence D., Burrow P.D. Resonant dissociation of N₂ by electron impact // J. Phys. B, 1979, Vol.12, №5, P.L179-L184.
- 12. Cosby P.C. Electron-impact dissociation of nitrogen // J. Chem. Phys., 1993, Vol.98, №12, P.9544-9553.
- 13. Märk T.D. // J. Chem. Phys. Cross section for single and double ionization of N₂ and O₂ molecules by electron impact from threshold up to 170 eV, // 1975, Vol.63, №9, P.3731-3736.
- 14. Straub H.C. Renault P., Lindsay, B.G., Smith K.A., Stebbings R.F. Absolute partial cross sections for electron-impact ionization of H2, N2, and O2 from threshold to 1000 eV // Phys. Rev. A, 1996, Vol.54, №3, P.2146-2153.
- 15. Krishnakumar E., Srivastava S.K. Cross sections for the production of N_2^+ , $N^++N_2^{2+}$ and N^{2+} by electron impact on N_2 // J. Phys. B, 1990, Vol.23, No11, P.1893-1904.
- 16. Hake R.D. Jr., Phelps A.V. Momentum-Transfer and Inelastic-Collisions Cross Sections for Electrons in O₂, CO, and CO₂ // Phys. Rev., 1967, Vol.158, №1, P.70-84.
- 17. Исламов Р.Ш., Кочетов И.В., Певгов В.Г. // Анализ процессов взаимодействия электронов с молекулой кислорода // Препринт № 169, 1977, М: ФИАН.
- Jeon B.-H. Determination of Electron Collision Cross-Sections for the Oxygen Molecule by Using an Electron Swarm Study // J. Korean Phys. Soc., 2003, Vol.43, №4, P.513-525.
 Trajmar S., Cartwrite D.C., Williams W. Differential and Integral Cross Sections for the
- 19. Trajmar S., Cartwrite D.C., Williams W. Differential and Integral Cross Sections for the Electron-Impact Excitation of the $a^{l} \Delta_{g}$ and $b^{l} \Sigma_{g}^{+}$ States of O₂ // Phys. Rev. A, 1971, Vol.4, No4, P.1482-1491.
- 20. Lawton A., Phelps A.V. Excitation of the $b^{l}\Sigma_{g}^{+}$ state of O₂ by low energy electrons // J. Chem. Phys., 1978, Vol.69, No.3, P.1055-1068.
- Wong S.F., Boness L., Schulz G.J. Vibrational Excitation of O₂ by Electron Impact above 4 eV // Rhys. Rev. Lett., 1973, Vol.31, P.969-972.
- 22. Trajmar S., Williams W., Kuppermann A. Angular Dependence of Electron Impact Excitation Cross Sections of O₂ // J. Chem. Phys., 1972, Vol.56, №8, P.3759-3765.
- Itikawa Y., Ichimura A., Onda K., Sakimoto K., Takayanagi K., Hatano Y., Nishimura H., Tsurubuchi S. Cross Sections for Collisions of Electrons and Photons with Oxygen Molecules // J. Phys. Chem. Ref. Data., 1989, Vol.18, №1, P.23-42.
- 24. Rapp D., Briglia D.D. Total Cross Sections for Ionization and Attachment in Gases by Electron Impact. II. Negative-Ion Formation // J. Chem. Phys., 1965, Vol.43, №5, P.1480-1489.
- 25. O'Malley T.F. Calculation of Dissociative Attachment in Hot O₂ // Phys. Rev., 1967, Vol.155, №1, P.59-63.
- 26. Jaffke T., Meinke M., Hashemi R, Christophorou L.G, Illenberger E. Dissociative Electron Attachment to Singlet Oxygen // Chem. Phys. Lett., 1992, Vol.193, P.62-67.
- 27. Geltman S. Free-free radiation in electron-neutral atomic collisions// J. Quant. Spectr. Rad. Transfer. 1973, Vol.13, P.610-613.
- 28. Laher R.R., Gilmore F.R. Updated excitation and ionization cross sections for electron impact on atomic oxygen // J. Phys. Chem. Ref. Data., 1990, Vol.19, №1, P.277-305.

- 29. Ormonde S., Smith K., Torre B.W., Davies A.R. Configuration-Interaction Effects in the Scattering of Electrons by Atoms and Ions of Nitrogen and Oxygen // Phys. Rev. A, 1973, Vol.8, №1, P.262-295.
- 30. Berrington K.A., Burke P.G., Robb W.D. The scattering of electrons by atomic nitrogen // J. Phys. B, 1975, Vol.8, №15, P.2500-2511.
- 31. Electron impact cross sections for ionization and excitation. NIST: <u>http://physics.nist.gov/PhysRefData/Ionization/Xsection.html</u>
- 32. Dutton J. // A Surwey of Electron Swarm Data, J. Phys. Chem. Ref. Data., 1975, Vol.4, №3, P.577-856.
- 33. Roznerski W., Leja K. Electron drift velocity in hydrogen, nitrogen, oxygen, carbon monoxide, carbon dioxide and air at moderate E/N // J. Phys. D, 1984, Vol.17, №2, P.297-286.
- Khmara D, Kolesnichenko Yu. Rate constants of electron-neutral collisions i gas discharge plasma // Proc. IV Workshop (Intern.) on Magneto- and Plasma Aerodynamics for Aerospace Applications. Moscow: IVTAN, 2002, P.280-291.
- 35. Kim Y.-K., Desclaux J.-P. Ionization of carbon, nitrogen, and oxygen by electron impact // Phys. Rev. A, 2002, Vol.66, №6, P.012708 (12 pages).