

УДК 533.6.011

ФИЗИКО–ХИМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ФОРМИРОВАНИЯ НЕРАВНОВЕСНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ N₂ В ОБЛАСТИ ВАКУУМНОГО УЛЬТРАФИОЛЕТА ЗА УДАРНОЙ ВОЛНОЙ В ВОЗДУХЕ

Горелов В.А., Киреев А.Ю.

ФГУП «Центральный Аэрогидродинамический институт им. проф. Н.Е. Жуковского»
(ЦАГИ), г. Жуковский, Московская обл., 140180

va_gorelov@mail.ru

Аннотация

Разработана физико-химическая модель образования неравновесного молекулярного излучения в спектральной области вакуумного ультрафиолета (ВУФ излучение – длина волны короче 200 нм) за ударной волной в воздухе в диапазоне изменения ее скорости 4.5–9.5 км/с. Численная модель верифицирована с использованием результатов экспериментов в ударной трубе по исследованию эффекта фотоионизации воздуха перед фронтом ударной волны в диапазоне длин волн ионизирующего излучения 85–105 нм. Установлены особенности неравновесного ВУФ излучения, в частности, формирование его в очень тонком высокотемпературном слое за фронтом ударной волны и влияние на ВУФ излучение особенностей распределения температуры электронов.

PHYSICAL–CHEMICAL MODEL OF NONEQUILIBRIUM VACUUM ULTRAVIOLET RADIATION OF N₂ FORMATION BEHIND A SHOCK WAVE IN AIR

Gorelov V.A., Kireev A.Y.

Central Aerohydrodynamic Institute (TsAGI),
Russia, Zhukovsky, Moscow region, 140180

The physical – chemical model of nonequilibrium molecular radiation formation in vacuum ultraviolet spectral range (VUV radiation- wavelength is shorter 200 nm) behind a shock wave in air at velocities 4.5 – 9.5 km/s is developed. The numerical model is verified with use of laboratory results obtained in a shock tube at study of photoionization of air ahead shock wave front by ionizing radiation with wavelengths 85 – 105 nm. Features of nonequilibrium VUV radiation, in particular, it's generating in very thin high–temperature layer behind front of a shock wave and influence on VUV radiation of electron temperature distribution feature are established.

1. Введение

В последнее десятилетие в аэрокосмических исследованиях большое внимание уделяется изучению особенностей лучистых тепловых потоков к поверхности космических аппаратов (КА) в условиях высокоскоростного входа в атмосферу Земли. Это обусловлено разработкой аэрокосмических проектов с возвращением КА или их элементов на Землю. При скорости входа в атмосферу свыше 7 км/с излучение ударного слоя около КА необходимо учитывать в суммарном балансе теплового потока к его поверхности. Наименее изученной составляющей лучистого теплового потока является область вакуумного ультрафиолета (ВУФ). Это связано с тем, что ВУФ излучение интенсивно поглощается в тракте спектрометрической аппаратуры. Вакуумное ультрафиолетовое излучение ударного слоя около поверхности ГЛА представляет собой излучение с длиной волны короче 200 нм. Эта длина волны соответствует коротковолновой границе пропускания кварца. Существуют оптические материалы с границей пропускания излучения до 120 нм, но излучение с длинами волн $\lambda < 200$ нм ин-

тенсивно поглощается и в воздухе. Поэтому для его исследования необходимо использовать спектральную аппаратуру с вакуумной откачкой всего внутреннего объема спектрометра и всего тракта вывода излучения и транспортировки от исследуемого объема высокотемпературного газа и до устройства регистрации этого излучения.

К настоящему времени количественные данные по измерению ВУФ излучения ударной волны в воздухе ограничены результатами отдельных измерений при $\lambda \geq 120$ нм [1]. Но, как показывают результаты численного моделирования и летных экспериментов, вклад ВУФ излучения в лучистый тепловой поток может быть значительным. Это иллюстрирует гистограмма, приведенная на рис.1 [2]. На гистограмме показана интенсивность радиационного потока к поверхности космического аппарата типа ORION при длинах волн $\lambda < 200$ нм (ВУФ излучение) и $\lambda > 200$ нм в условиях полета со скоростью ~ 11 км/с на высоте ~ 60 км. Оценочный анализ проведен с использованием известной программы NEQAIR. Гистограммы голубого и красного цвета соответствуют модели оптически тонкой среды и среды с учетом поглощения излучения в ударном слое.

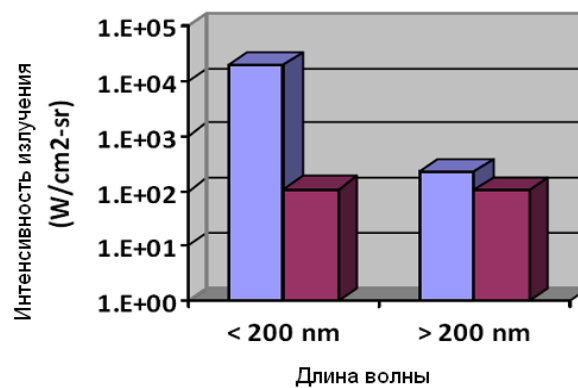


Рис.1.

В данной работе предлагается физико-химическая модель генерирования неравновесного ВУФ излучения прямой ударной волны в воздухе и методика ее экспериментальной верификации с использованием результатов экспериментов по исследованию эффекта фотоионизации воздуха перед фронтом ударной волны. Рассматриваемый диапазон скорости распространения ударной волны $V = 4.5 - 9.5$ км/с, спектральный диапазон излучения 85 – 105 нм. Предполагается, что в этих условиях основной вклад в ВУФ излучение воздуха вносит излучение молекул азота в системах полос Берджа – Хопфилда [1,2]. Краткое изложение результатов работы опубликовано в [3, 4].

2. Спектральная модель неравновесного излучения

В работе используется модель оптически тонкой среды с приближенной спектральной моделью, в которой производится усреднение по вращательной структуре электронного спектра рассматриваемых переходов молекулы N₂. Определим эту модель как «квазиспектральную модель» (КСМ), в отличие от «спектральной модели» (СМ), в которой рассматривается полная линейчатая структура спектра без каких-либо усредняющих процедур (модель «line-by-line»). В используемой модели КСМ для вычисления интенсивности излучения молекулярных полос N₂ используется следующая упрощенная формула:

$$I_{\lambda} = 3.22 \times 10^{-10} \times d \times \lambda^{-6} \times \frac{n_{el,v}}{Q_{el,v}} \times \sum_{v'} \sum_{v''} S_{v'v''} \times \frac{1}{|\Delta B_{v'}|} \times \exp\left(-\frac{hcE_{v'}}{kT_{v'}}\right) \times \exp\left[-\frac{hcB_{v'}}{kT_r \Delta B_{v''}} (\omega - \omega_{v'v''} + B_{v'v''})\right], \quad (1)$$

- $I_\lambda I$ – интенсивность излучения (вт/см³ стер мкм);
 $n_{el,v}$ – заселенность верхнего электронного состояния, см⁻³;
 T_v – колебательная температура, К; T_r – вращательная температура, К;
 ω – волновое число, см⁻¹;
 $\omega_{v'v''}$ – волновое число электронно-колебательного перехода, см⁻¹;
 $E_{v'}$ – характеристическая колебательная энергия, см⁻¹;
 $S_{v'v''}$ – сила электронно-колебательного перехода, связанная с коэффициентом Эйнштейна $A_{v'v''}$ соотношением

$$S_{v'v''} = \frac{(2S+1) \times g_{\Lambda'}}{2.026 \times 10^{-6} \times \omega_{v'v''}^3} \times A_{v'v''},$$

где d – множитель, зависящий от модели расчета $Q_{el,v}$ (в приближении «жесткий ротатор – гармонический осциллятор» $d=1/\sigma$); σ – число симметрии ($\sigma=1$ для гетероядерных молекул и $\sigma=2$ для гомоядерных молекул); $(2S+1)$ – мультиплетность электронного состояния; $Q_{el,v'}$ – колебательно-вращательная статсумма; B_v – вращательная постоянная; $\Delta B_{v'v''} = B_{v'} - B_{v''}$; $g_{\Lambda'} = 1$ для Σ -состояний; $g_{\Lambda'} = 2$ для всех других электронных состояний.

При расчетах использовались данные по спектроскопическим характеристикам молекул и коэффициенты Эйнштейна $A_{v'v''}$ для переходов, рекомендованные в [5]. Предполагается, что распределение колебательных уровней возбужденного электронного состояния молекул является больцмановским с температурой T_v основного электронного состояния.

Для определения интенсивности излучения в молекулярных системах полос необходимо иметь информацию относительно заселенности верхнего электронного состояния, поступательной и колебательных температур в высокотемпературном ударном слое.

Отметим, что КСМ с успехом применяется для численного определения интенсивности интегрального излучения в рассматриваемых переходах двухатомных молекул для условий, когда поглощением излучения можно пренебречь. В работе [6] проведено сравнение использования методов КСМ и СМ при расчетах лучистых тепловых потоков. Несмотря на сильное различие в структуре спектра при использовании этих двух численных моделей, различие в интегральных лучистых потоках не превышало 4 %.

Может возникнуть вопрос о правомерности использования модели оптически тонкой среды в случае расчета ВУФ излучения, которое интенсивно поглощается в среде, содержащей кислород. В данной работе рассматриваются процессы генерации ВУФ излучения за ударной волной, а не его переноса. Как будет следовать из представленных ниже результатов проведенного исследования, генерирование неравновесного ВУФ излучения происходит в очень тонком слое газа за фронтом ударной волны и в этом случае использование приближения оптически тонкой среды может быть оправданным.

Как уже отмечалось в данной работе, предполагалось, что ВУФ излучение в диапазоне длин волн $\lambda < 100$ нм формируется в рассматриваемом скоростном режиме, в основном, молекулярными переходами азотных молекулярных систем полос Берджа – Хопфильда: ВН1 ($b^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$) и ВН2 ($b^1\Sigma_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$) (Рис. 2).

Разработанная схема реакций заселения (распада) возбужденных электронно-колебательных состояний азота включает в себя: неупругие столкновения с электронами, атомами и молекулами и радиационное обеднение уровней.

Расчет заселенности возбужденных состояний проводился с использованием балансного уравнения

$$\frac{dn_i}{dt} = W_{1i} + W_{2i} - \frac{n_i}{\tau_i} \quad (2)$$

Индекс $i = 1, 2$ соответствует переходам ВН1 и ВН2.

W_{1i} – скорость заселения в ходе соударений с атомами и молекулами (М)

$$W_{1i} = (k_{f1i}(T) \cdot n_{N_2(X)} - k_{r1i}(T) \cdot n_{N_2(i)}) \cdot M;$$

W_{2i} – скорость заселения в ходе соударений со свободными электронами.

$$W_{2i} = (k_{f2i}(T_e) \cdot n_{N_2(X)} - k_{r2i}(T_e) \cdot n_{N_2(i)}) \cdot N_e;$$

τ_i – время высвечивания возбужденного состояния.

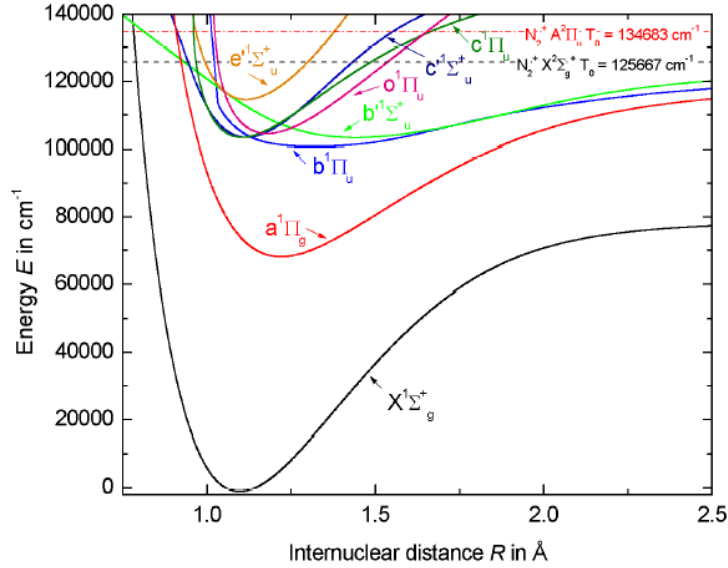


Рис.2. Схема электронных термов молекулы азота

Константы скоростей k_f были получены с использованием результатов работ [7, 8] для реакций:

1. $N_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightleftharpoons N_2(b^1\Pi_u) + e$
2. $N_2(X^1\Sigma_g^+) + M \rightleftharpoons N_2(b^1\Pi_u) + M$
3. $N_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightleftharpoons N_2(b^1\Sigma_u) + e$
4. $N_2(X^1\Sigma_g^+) + M \rightleftharpoons N_2(b^1\Sigma_u) + M$

В форме Аррениуса ($k_f = AT^B \exp(-C/T)$, см³/с) они представлены в Таблице 1.

Таблица 1

Реакция	A	B	C (эВ)	Примечание
1	1.34×10^{-9}	0.87	12.5	$k_f = k_f(T_e)$
2	3.62×10^{-10}	-0.5	12.5	
3	1.87×10^{-9}	0.85	12.855	$k_f = k_f(T_e)$
4	3.73×10^{-10}	-0.5	12.855	

Коэффициенты A варьированы по результатам экспериментальной верификации (см. ниже).

Константы скоростей обратных реакций k_r определялись с использованием констант равновесия для рассматриваемых переходов.

Радиационный распад электронно-колебательного возбужденного состояния учитывается с использованием данных [5] по коэффициентам Эйнштейна. Спектроскопические константы молекул в основном и возбужденных электронных состояниях также заимствованы из [5].

Помимо подхода, в котором использовалось балансное уравнение, рассматривались приближенные модели. В частности, широко используемая в США квазистационарная модель (QSS – model), которая соответствует случаю $dn/dt=0$ в уравнении (2). В сравнительном анализе использовалась и равновесная «больцмановская модель», в которой применена экспоненциальная зависимость от поступательной температуры газа.

Необходимые значения температур и концентраций атомов, молекул и электронов в неравновесной области за фронтом ударной волны в воздухе определялись с использованием представленной ниже кинетической модели.

Для примера, на рис. 3 представлены спектры излучения ударной волны в воздухе при скорости движения 8.5 км/с и начальном давлении перед ударной волной 0.5 тор, рассчитанные по представленной методике для систем ВН1 и ВН2.

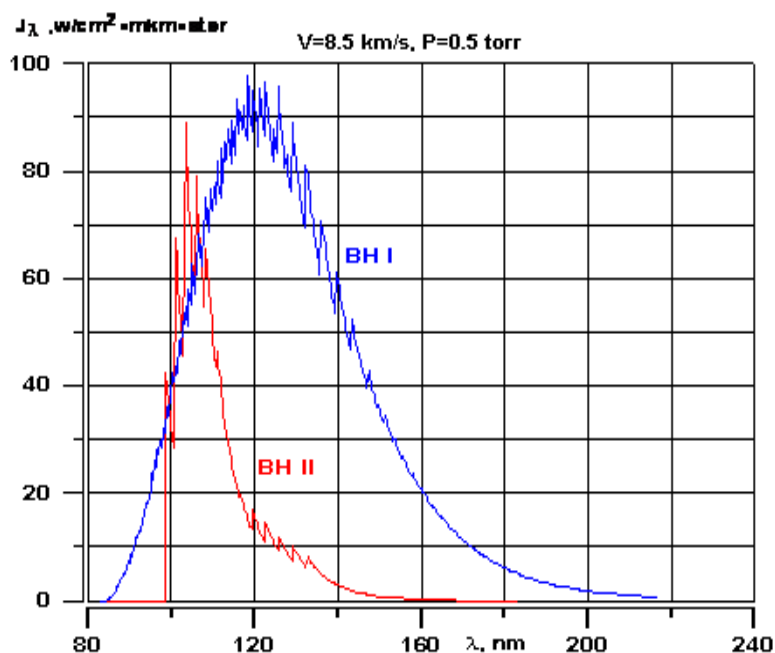


Рис 3. Пример расчета спектра излучения ударной волны в системах ВН 1 и ВН 2

3. Кинетическая модель неравновесных процессов за ударной волной

Численное моделирование неравновесных процессов за ударной волной основано на использовании физико-химической модели высокотемпературного воздуха и моделей неравновесного излучения. Газ за ударной волной при рассматриваемых скоростях моделируется следующими компонентами N_2 , O_2 , NO , N , O , NO^+ , N_2^+ , O_2^+ , O^+ , N^+ и электроны e . Чтобы моделировать неравновесное излучение в системах полос молекул химические процессы в газообразной смеси дополнены соответствующей кинетикой образования возбужденных электронно-колебательно-вращательных состояний молекул. В кинетической модели используется многотемпературная модель колебательной релаксации, то есть колебательные температуры молекул T_{v,N_2} , T_{v,O_2} , $T_{v,NO}$ и поступательная температура T отличаются друг от друга. Принималось, что вращательные степени свободы молекул находятся в равновесии с поступательными степенями свободы газообразной смеси. Температура свободных электронов отличается от T , T_{v,N_2} , T_{v,O_2} , $T_{v,NO}$ и определяется системой балансных уравнений.

4. Возбуждение колебательных степеней свободы молекул

Моделирование взаимодействия между колебательными и поступательными степенями свободы осуществлялось на основе соотношения Ландау–Тейлора с использованием поправки Парка для высоких температур. Учитывался обмен энергии между колебательными степенями свободы молекул и изменение колебательной энергии молекул в химических реакциях.

Возбуждение колебательных уровней N₂ электронными столкновениями определяется реакцией:



Влияние этого процесса на колебательную релаксацию молекулы N₂ было учтено посредством использования констант скоростей возбуждения колебательных уровней молекулы N₂ электронами из [9]. Эта реакция играет важную роль в энергетическом балансе электронного газа и влияет на распределение электронной температуры в ударном слое (см. раздел Электронная температура).

5. Процессы диссоциации

В рассматриваемом температурном диапазоне диссоциация молекул N₂, O₂ и NO за ударной волной происходит одновременно с их колебательным возбуждением. Этот факт обуславливает сильное взаимодействие и взаимовлияние между колебательной релаксацией молекул и их диссоциацией – эффект колебательно-диссоциационного взаимодействия (КДВ). Влияние неравновесного возбуждения колебательных степеней свободы молекул на диссоциацию было учтено введением двухтемпературной зависимости константы скорости диссоциации $k(T, T_v) = k_0(T) \Phi(T, T_v)$. $k(T)$ – термически-равновесная константа скорости реакции диссоциации при $T_v = T$, а вид фактора неравновесности – функции $\Phi(T, T_v)$, зависит от выбора модели КДВ.

В данной работе при численном моделировании процесса неравновесного УФ излучения использовались две модели КДВ. Первая – полуэмпирическая модель Парка, в которой константа скорости неравновесной диссоциации определяется «эффективной температурой» $T_{эфф} = T_v^{0.5} T^{0.5}$. Вторая – широко используемая модель CVDV с параметром $U = D/6$ (D – энергия диссоциации рассматриваемой двухатомной молекулы).

6. Процессы ионизации

Процессы ионизации могут оказать существенное влияние на формирование излучения, поскольку реакции возбуждения электронных уровней атомов и молекул электронным ударом при высоких скоростях ударной волны становятся важным фактором. Принималось, что электроны в ударном слое формируются в трех ассоциативных реакциях ионизации и в реакциях ионизации электронным ударом, которые приведены в табл. 2.

Константы скорости реакций с участием электронов зависят от электронной температуры, которая отличается от поступательной и колебательных температур.

Помимо приведенных выше реакций ионизации учитывались процессы обмена зарядом между положительно заряженными атомами и молекулами и нейтральными компонентами плазмы за ударной волной. Реакции обмена зарядом и константы их скоростей приведены в работе [9].

7. Электронная температура

Температура электронов T_e определяется из уравнения баланса электронной энергии:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{3}{2} T_e n_e \right) = U_{a.i.} + U_{el.} + U_{e-R} + U_{e-v}$$

Таблица 2

Реакции	$k_{f,r}$, см ³ /моль·с
$N + O \rightleftharpoons NO^+ + e$	$k_r = 2.6 \times 10^{19} \cdot T_e^{-1}$
$N + N \rightleftharpoons N_2^+ + e$	$k_r = 5.0 \times 10^{18} \cdot T_e^{-1/2}$
$O + O \rightleftharpoons O_2^+ + e$	$k_r = 5.0 \times 10^{19} \cdot T_e^{-1}$
$NO + e \rightleftharpoons NO^+ + e + e$	$k_f = 6.5 \times 10^{23} \cdot T_e^{-1.7} \exp(-107370/T_e)$
$N + e \rightleftharpoons N^+ + e + e$	$k_f = 4.5 \times 10^{-7} \cdot T_e^5 \exp(-118840/T_e)$
$O + e \rightleftharpoons O^+ + e + e$	$k_f = 5.2 \times 10^{12} \cdot T_e^{0.67} \exp(-157980/T_e)$
$O_2 + e \rightleftharpoons O_2^+ + e + e$	$k_f = 1 \times 10^{-13} \cdot T_e^6 \exp(-140150/T_e)$
$N_2 + e \rightleftharpoons N_2^+ + e + e$	$k_f = 1.8 \times 10^{13} \cdot T_e^{0.6} \exp(-168770/T_e)$

Следующие электронные процессы обмена энергии были приняты во внимание в уравнении баланса электронной энергии:

а) Появление электронов с энергией $E \approx kT$ из реакций ассоциативной ионизации и потеря электронной энергии в реакциях рекомбинации ионов и электрона [10]

$$U_{a.i.} = \frac{3}{2} \sum_{j=1}^3 (T \cdot R_{fj} - T_e \cdot R_{rj}),$$

где R_{fj}, R_{rj} – скорости прямых (f) и обратных (r) реакций ассоциативной ионизации j .

б) Обмен энергии в упругих столкновениях с электронами и тяжелыми частицами [11]

$$U_{el.} = \sum_i \frac{3m_e}{m_i} v_{ei} n_e (T - T_e),$$

где v_{ei} – частота столкновений; m_e, m_i – массы электрона и тяжелой частицы.

в) Обмен энергией с вращательными степенями свободы молекул [11].

$$U_{e-R} = \sum_{j=1}^3 \frac{64}{\sqrt{3}} B_j \left(\frac{8kT_e}{\pi m_e} \right)^{0.5} \sigma_R \left(\frac{T}{T_e} - 1 \right) \cdot n_j n_e,$$

где k – постоянная Больцмана; $\sigma_R = \frac{2\pi s_j^2}{15ea_0^2}$ – поперечное сечение; s_j – квадрупольный момент молекулы и B_j – вращательная постоянная молекулы j (N_2, O_2, NO).

г) Возбуждение колебательных уровней молекулы N_2 через реакцию (3) [12].

$$U_{e-v} = \frac{n_e n_{N_2}}{q} \sum_{v=0}^8 v \theta_{N_2} \left[\exp\left(-\frac{v \theta_{N_2}}{T_e}\right) \cdot \sum_{v'=1}^9 k_{vv'}(T_e) \cdot \exp\left(\frac{v' \theta_{N_2} (T_{vN_2} - T_e)}{T_{vN_2} T_e}\right) \right] - \exp\left(-\frac{v \theta_{N_2}}{T_{vN_2}}\right) \cdot \sum_{v'=1}^9 k_{vv'}(T_e),$$

где q – колебательная статсумма молекулы N_2 ; $k_{vv'}(T_e)$ – константа скорости реакции (3) ($v < v'$).

Аппроксимация в форме Аррениуса констант скоростей реакции (3) [12] приведена в табл. 3 для некоторых колебательных чисел v, v' и диапазона энергии электронов от 0.5 до 6.0 эВ.

Процесс (3) определяет главным образом распределение T_e при условиях слабой диссоциации N_2 . Вследствие электронно-колебательного обмена энергией в реакции (3), элек-

тронная температура T_e быстро сравнивается с колебательной температурой азота в зоне релаксации за фронтом ударной волны.

Таблица 3

$$k_{vv'}(T_e) = AT_e^n \exp(-C/T_e); \text{ где } A \text{ в } 10^{-10} \text{ см}^3/\text{с}, T_e, \text{ в эВ}$$

V	0	0	1	0	1	2	0	1	2	3
V'	1	2	2	3	3	3	4	4	4	4
A	83	63	116	58	169	35	49	147	24	54
N	-0.5	-1.1	-1.3	-1.5	-1.4	-1.0	-1.5	-1.5	-1.0	-1.2
C	1.7	1.9	2.0	2.3	2.0	1.5	2.4	2.1	1.4	1.3

8. Верификация модели на основе экспериментов в электроразрядной ударной трубе

В связи со сложностью спектральных измерений интенсивности ВУФ излучения ударной волны для верификации представленной модели разработана методика определения ВУФ излучения ударной волны по эффекту фотоионизации воздуха перед ее фронтом. Эксперименты по исследованию фотоионизации воздуха перед фронтом ударной волны были проведены в электроразрядной ударной трубе ЦАГИ для давлений $P_1 = 0.2$ и 0.5 тор. [10]. На рис. 4 представлены результаты измерения концентрации электронов N_e перед фронтом ударной волны в диапазоне изменения ее скорости $V = 6 \div 14$ км/с при давлении воздуха в канале ударной трубы $P_1 = 0.2$ тор.

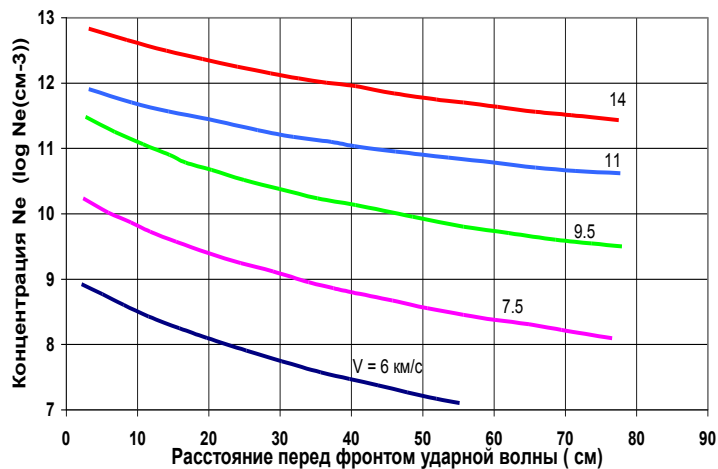


Рис.4. Результаты измерения концентрации электронов перед фронтом ударной волны

Основной массив экспериментальных результатов измерения N_e получен с помощью электростатических зондов. Для контроля и оценки погрешности определения N_e перед ударной волной применялся метод резонансных СВЧ-зондов [11]. Результаты сравнения измерения N_e с помощью этих двух методов при $V = 11.3$ км/с показан на рис. 5 расхождение между результатами зондовых и СВЧ-измерений, которое можно трактовать что точность определения концентрации электронов в области фотоионизации, не превышает 30%.

В проведенных исследованиях этого эффекта установлено, что перед ударной волной происходит фотоионизация молекул O₂ в диапазоне длин волн $\lambda = 85\text{--}105$ нм и при концентрации электронов в зоне фотоионизации $N_e \leq 10^{12}$ см⁻³ можно пренебречь процессами рекомбинации и прилипания электронов перед ударной волной [13].

Для анализа результатов экспериментов рассматривалось фотоионизирующее излучение области газа за ударной волной, представляющей дисковый источник с радиусом r равным внутреннему радиусу канала ударной трубы (57мм).

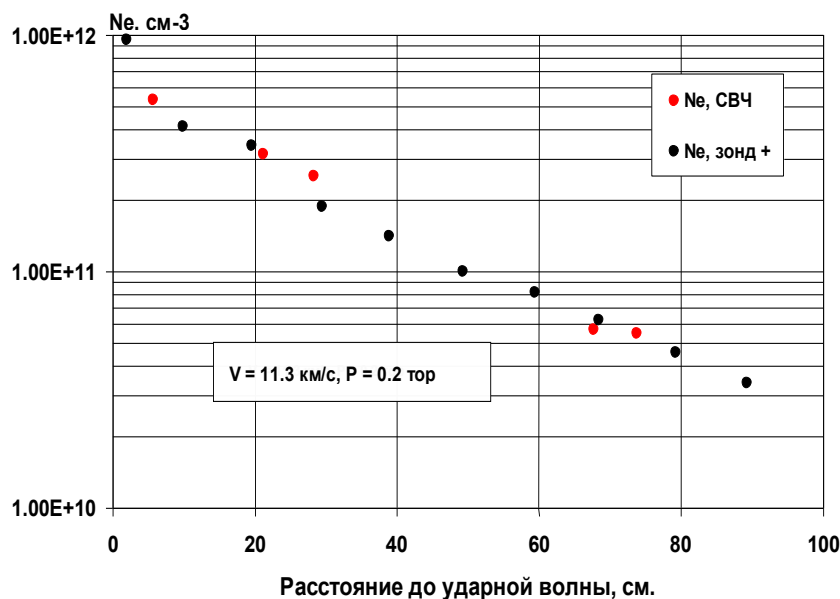


Рис 5. Сравнение результатов зондовых и СВЧ измерений распределения концентрации электронов перед ударной волной

В этом случае может быть получена формула для распределения концентрации электронов по оси канала ударной трубы перед фронтом ударной волны при усредненном значении коэффициента поглощения k в спектральной области фотоионизации молекулы кислорода [13].

$$N_e(x) \approx \frac{2\pi k}{VI} \int_{\lambda_0}^{\lambda_I} J_\lambda d\lambda \int_x^\infty dx \int_0^{\theta_R} \exp(-kx/\cos\theta) \sin\theta d\theta, \tag{4}$$

где (λ_0, λ_I) – область длин волн для процесса фотоионизации кислорода; I – «цена электрона» в процессе фотоионизации; $\theta = \arctg(r/x)$, где r – значение текущего радиуса рассматриваемого излучающего дискового слоя; значение θ_R соответствует радиусу канала трубы R . Проведя интегрирование в (4), можно получить соотношение

$$N_e(x) \approx \frac{2\pi J}{VI} \left[E_3(kx) - E_3\left(k\sqrt{x^2 + R^2}\right) \right] \tag{5}$$

где $J = \int_{\lambda_0}^{\lambda_I} J_\lambda d\lambda$ – поток фотоионизирующего ВУФ излучения ударного слоя; E_3 – интегро-экспоненциальная функция 3-го рода. Измеренные значения концентраций электронов $N_e = f(V)$ в зоне фотоионизации на разных расстояниях от фронта ударной волны ($x = 1, 10, 20$ см), представленные на рис. 6, с помощью (5) позволяют решить задачу определения интенсивности ВУФ излучения ударной волны J (вт/см²ср) в рассматриваемом спектральном интервале.

На рис.7 показаны значения интенсивности ВУФ излучения ударной волны (J), полученные с использованием соотношения (5) при обработке результатов экспериментов со значениями $x = 1, 10$ и 20см.

Кривая – результат соответствующего расчета J по представленной выше численной модели. В этом расчете использовалась КДВ модель Парка. Расхождение между результатами эксперимента и расчета составляет ~ 45% при скорости 4.7 – 6 км/с и ~ 30% в диапазоне изменения скорости 7 – 9.5 км/с.

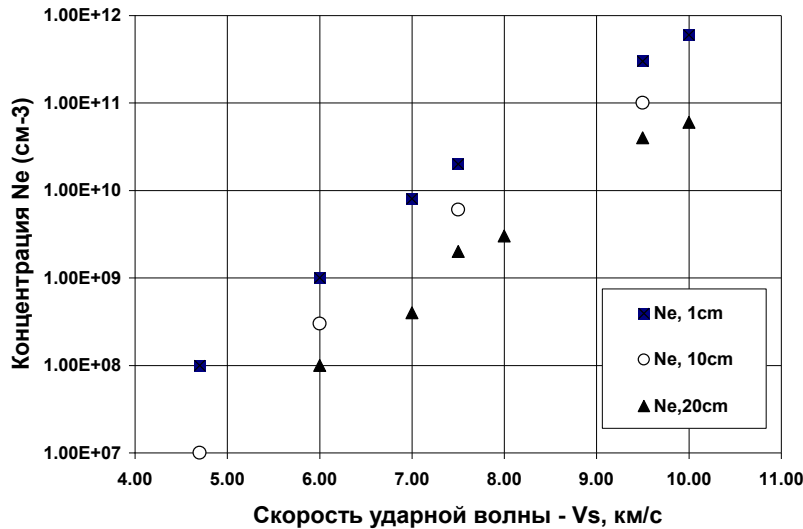


Рис. 6. Результаты измерения N_e на расстояниях 1, 10 и 20 см перед ударной волной при начальном давлении воздуха в канале ударной трубы 0.5 тор

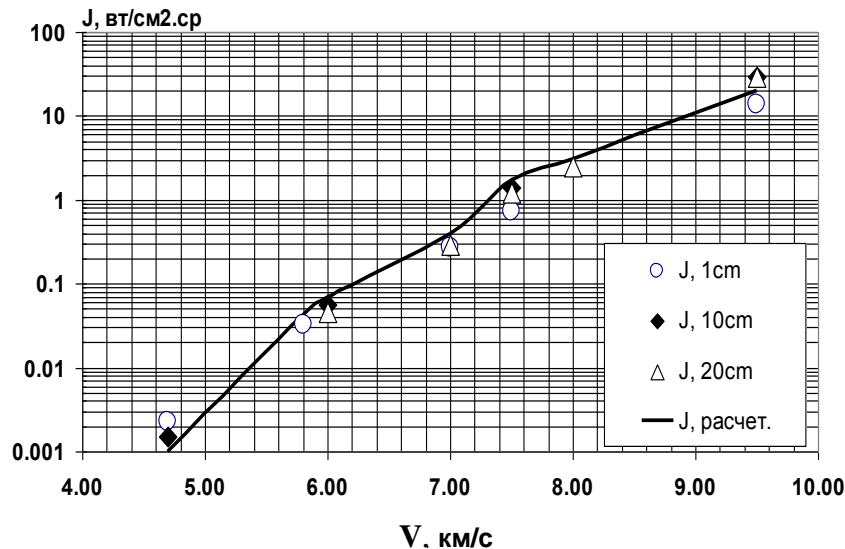


Рис.7. Зависимость интенсивности ВУФ излучения ударной волны от скорости ее движения в воздухе при начальном давлении 0.5 тор. Кривая – расчет. Точки соответствуют фотоионизационным измерениям на различных расстояниях от фронта ударной волны

9. Некоторые результаты численного моделирования неравновесного ВУФ излучения ударной волны

На рис. 8 и 9 представлены результаты расчетов профилей температур T , T_e и T_{VN_2} и интенсивности ВУФ излучения в диапазоне $85 \div 105$ нм за ударной волной. Наблюдается резкий пик величин T и T_e за фронтом ударной волны с максимальными значениями ~ 35000 К. Вследствие резонансного энергообмена T_e быстро выравнивается с T_{VN_2} . Интенсивное ВУФ излучение за ударной волной возникает в очень узкой области с характерной протяженностью ~ 0.02 см, что составляет примерно 10 длин свободного пробега молекул перед фронтом ударной волны. Эта особенность позволяет не рассматривать процесс поглощения ВУФ излучения в зоне его образования и оправдывает, в этом случае, рассмотрение оптически тонкой среды в спектральной модели и при интерпретации результатов верификационных экспериментов.

Особо отметим, что при $V \geq 8.5$ км/с существует вторичный максимум ВУФ излучения.

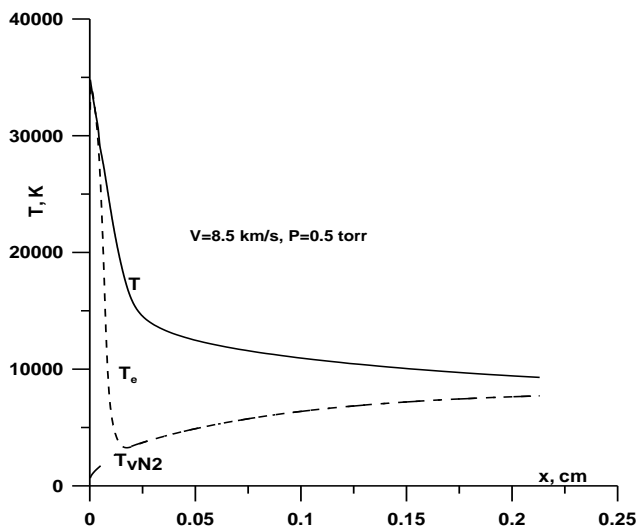


Рис.8. Распределение T , T_{vN_2} и T_e за фронтом ударной волны

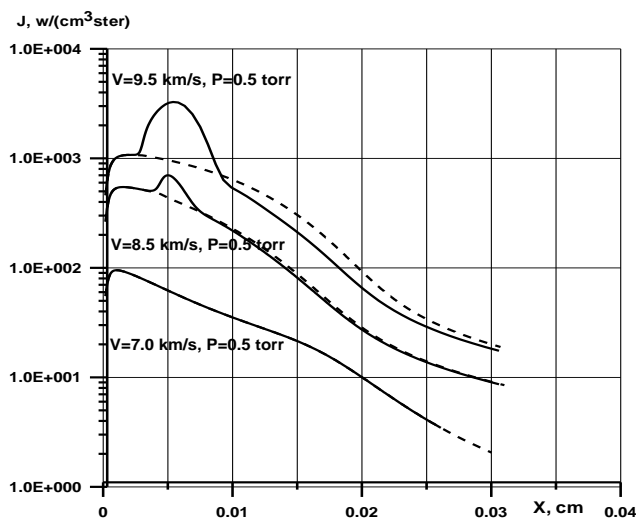


Рис.9. Профили интенсивности ВУФ излучения за фронтом ударной волны.

Для более наглядного соотношения между профилями интенсивности ВУФ излучения (J), T , T_e и концентрации электронов N_e на рис. 10. они сведены вместе.

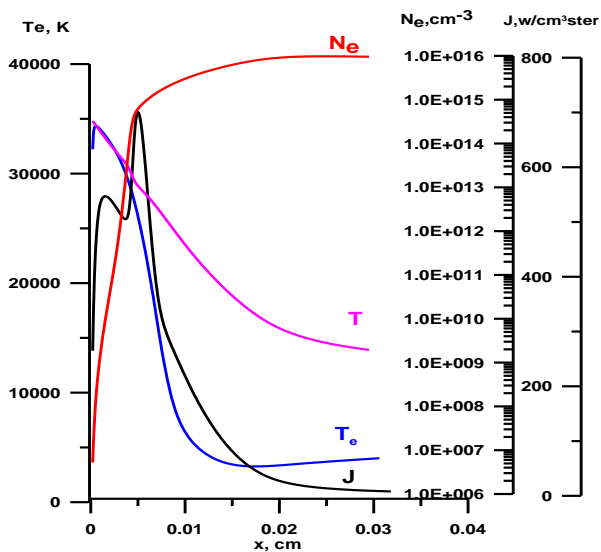


Рис. 10. Распределение J , T , T_e и N_e за фронтом ударной волны ($V=8.5$ км/с, $P=0.5$ тор)

Видно, что в рассматриваемых условиях первичный и вторичный максимумы ВУФ излучения возникают за ударной волной в области при температурах T и T_e свыше 20000⁰К.

Пик электронной температуры непосредственно за фронтом ударной волны объясняется появлением «горячих» электронов в процессах ассоциативной ионизации. Он наблюдался ранее в серии экспериментов, проведенных в электроразрядной ударной трубе [14]. При экспериментальном и численном моделировании неравновесного излучения в спектральной области с длинами волн свыше 200 нм, например, при исследовании неравновесного излучения в молекулярных системах NO и N₂⁺ [9], влияния пика T_e не проявлялось. Это связано с тем, что максимум излучения в выше указанных молекулярных системах достигался позднее, когда электронная температура приближалась к температуре поступательных и колебательных степеней свободы.

Вторичный пик ВУФ излучения обусловлен влиянием процессов возбуждения молекул N₂ при столкновении с электронами. Об этом свидетельствуют результаты расчета ВУФ излучения с «выключенными» процессами возбуждения электронным ударом в балансном уравнении. Результаты этого расчета показаны на рис.9 пунктирными кривыми.

Все представленные выше результаты численного моделирования ВУФ излучения демонстрируют его неравновесный характер. При этом, естественно, получаемый результат моделирования должен зависеть от отдельных элементов используемой кинетики. Подробный анализ этих зависимостей выходит за рамки данной работы. Здесь отметим, что результаты экспериментального верифицирования свидетельствуют об удачном выборе кинетической модели, основные элементы которой ранее были выбраны по результатам многочисленных исследований особенностей неравновесных излучательных и ионизационных процессов за сильными ударными волнами в воздухе и при высокоскоростном обтекании тел (например, [9, 14]).

Ниже приводятся два примера влияния отдельных элементов кинетической модели неравновесного ВУФ излучения на итоговый результат расчета.

Первый демонстрирует влияние использования различных моделей колебательно-диссоциационного взаимодействия (КДВ). На рис.11 показаны зависимости интенсивности неравновесного ВУФ излучения от скорости ударной волны, рассчитанные с использованием двух моделей КДВ.

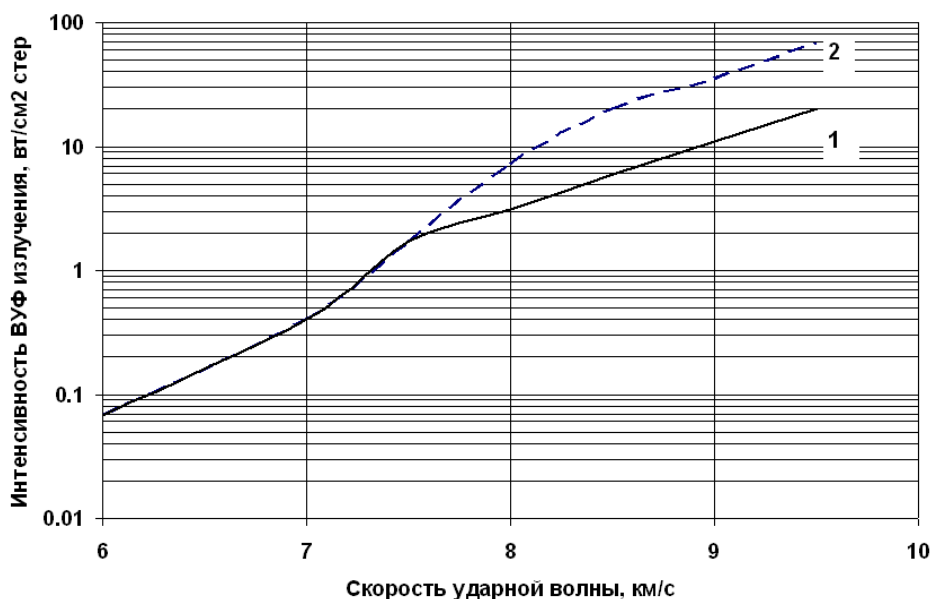


Рис.11. Влияние выбора моделей колебательно-диссоциационного взаимодействия на результат расчета ВУФ излучения

Сплошная кривая 1 соответствует расчету, выполненному с использованием полуэмпирической модели Парка, в которой константа скорости неравновесной диссоциации определяется «эффективной температурой» $T_{эфф} = T_v^{0.5} \times T^{0.5}$. Как следует из рис.6, этот результат расчета хорошо согласуется с верификационным экспериментом. Пунктирная кривая соответствует расчету, в котором использовалась известная модель CVDV с параметром $U = D/6$ (D – энергия диссоциации рассматриваемой двухатомной молекулы).

Видно, что при скорости ударной волны свыше 7.5 км/с расчет с использованием CVDV модели дает завышенный результат. При скорости ударной волны 9 км/с интенсивность излучения, рассчитанная с моделью CVDV, более чем в три раза превышает расчет с моделью Парка, согласующийся с экспериментом. Второй пример демонстрирует влияние процессов возбуждения систем Берджа – Хопфилда N_2 за ударной волной при столкновениях с тяжелыми частицами и свободными электронами.

На рис. 12. представлены результаты расчета интенсивности неравновесного ВУФ излучения ударной волны. Сплошная кривая 1 соответствует расчету, в котором учтены, согласно принятой спектральной модели излучения, процессы возбуждения состояний $b^1\Pi_u$ и $b^1\Sigma_u$ молекул азота в столкновениях с тяжелыми частицами (молекулами, атомами) и свободными электронами. Пунктирная кривая 2 соответствует случаю, когда столкновения со свободными электронами не учитываются. Видно, что при скорости свыше 8 км/с, в рассматриваемых условиях, столкновения со свободными электронами вносят существенный вклад в генерацию возбужденных состояний систем Берджа – Хопфилда. При этом в профиле неравновесного ВУФ излучения появляется вторичный пик, обусловленный возбуждением электронами.

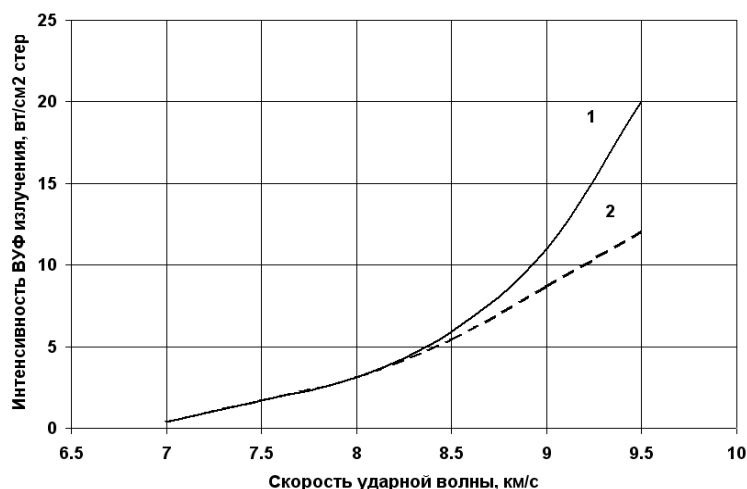


Рис. 12. Влияние процессов возбуждения систем Берджа – Хопфилда на интенсивность неравновесного ВУФ излучения ударной волны при начальном давлении воздуха 0.5 тор

В заключение краткого анализа результатов, рассмотрим степень влияния моделей, применяемых для расчета возбужденных состояний азота (например, $b^1\Pi_u$). На рис.13 показаны результаты расчета плотности возбужденных состояний $N_2(b^1\Pi_u)$ за ударной волной в воздухе при скорости 8.5 км/с и начальном давлении 0.5 тор. Представлены результаты полученные с использованием «модели Больцмана» по температуре T , (кривая 1), балансной модели данной работы (кривая 2) и модели QSS (кривая 3).

Видно, что «модель Больцмана», широко используемая в термодинамическом моделировании процессов излучения при высокоскоростным обтекании тел, в рассматриваемых условиях может привести к сильному завышению уровня ВУФ излучения. Модель данной работы в целом согласуется с QSS моделью. Но можно отметить, что при использовании QSS модели в приведенном примере отсутствует вторичный максимум заселенности возбужденного состояния.

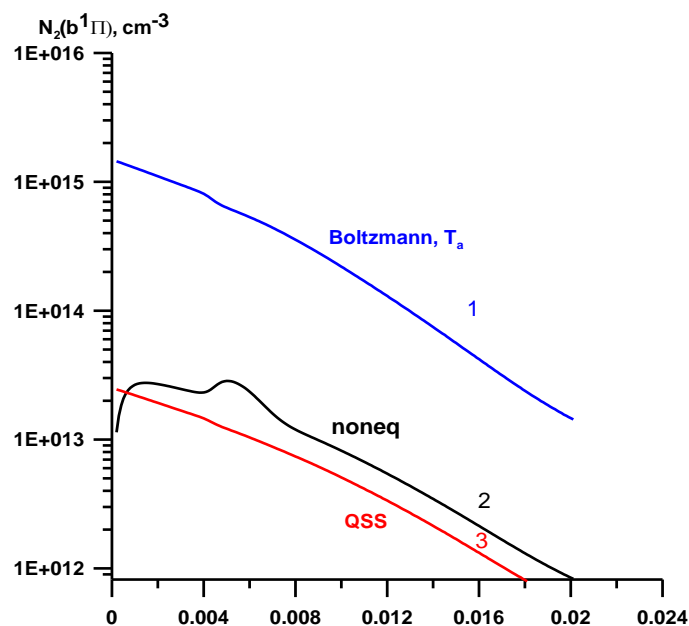


Рис. 13. Профили плотности возбужденных состояний за ударной волной

Заключение

По представленным результатам проведенных исследований могут быть сделаны следующие выводы и заключение.

Разработана физико-химическая модель для определения интенсивности неравновесного ВУФ излучения ударной волны в воздухе в молекулярных системах Берджа – Хопфилда с рассмотрением уровневой кинетики заселенности возбужденных состояний. Кинетическая модель включает широкий набор элементов, описывающих неравновесный характер протекания физико-химических процессов за фронтом ударной волны.

Установлено, что эксперименты по измерению фотоионизации воздуха перед фронтом ударной волны могут быть использованы для верификации модели формирования ВУФ излучения ударной волны в спектральном диапазоне $85 \div 105$ нм при скорости ударной волны $4.5 \div 9.5$ км/с. В ходе верификационных исследований показано, что в рассмотренных условиях разработанная модель формирования ВУФ излучения с хорошей точностью согласуется с экспериментом.

По результатам проведенных расчетов могут быть сделаны выводы о том, что формирование ВУФ излучения ударной волны в рассмотренных условиях носит существенно неравновесный характер. Максимум ВУФ излучения формируется в оптически тонком слое за фронтом ударной волны. Причем, если при скорости ударной волны менее 8 км/с основную роль в возбуждении систем Берджа – Хопфилда играют столкновения с атомами и молекулами, то при более высоких скоростях важную роль начинают играть электроны в высокотемпературной зоне за ударной волной.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ Грант 14-08-00976-а.

Литература

1. Bose D., McCorkle E., Bogdanoff D., and Allen G. Jr, Comparisons of Air Radiation Model with Shock Tube Measurements // AIAA 2009-1030, Orlando, Florida, Jan. 2009
2. Bose, D., McCorkle, E, Thompson, C., Bogdanoff, D., Prabhu, D., Allen, G., and Grinstead, J., Analysis and Model Validation of Shock Layer Radiation in Air // AIAA-2008-1246, Reno, NV, Jan. 2008
3. Горелов В.А., Киреев А.Ю. Неравновесное излучение ударной волны в воздухе в области вакуумного ультрафиолета // Письма в ЖТФ, 2012, Т. 38, № 24, С. 46–52.

4. Gorelov V.A., Kireev A.Yu. Nonequilibrium Radiation of the Shock Wave in Air in the Vacuum Ultraviolet Region// *Tech. Phys. Letters*, 2013, Vol. 39, No.1, Pp 33–35.
5. Суржиков С.Т. Оптические свойства газов и плазмы. М., Изд, МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2004
6. Johnston C.O. Nonequilibrium Shock-Layer Radiative Heating for Earth and Titan Entry//Dissertation for the degree of Doctor of Philosophy, 2006, Blacksburg, Virginia.
7. Cartwright D.C. Rate coefficients and inelastic momentum transfer cross sections for electronic excitation of N_2 by electrons// *J. Appl. Phys.*, 49(7), July 1976, Pp. 3855–3862.
8. Laux C.O. Optical Diagnostics and Radiative Emission of Air Plasmas// HTLG Report T-288, Stanford University, August 1993.
9. Gorelov V.A., Gladyshev M.K., Kireev A.Yu., Yegorov I.V., Plastinin Yu.A., Karabadzhak G.F. Experimental and Numerical Study of Nonequilibrium Ultraviolet NO and $N_2^+(1-)$ Emission in Shock Layer// *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 1998, Vol. 12, No. 2, Pp. 172–180.
10. Касьянов В.А., Подлубный Л.И. О теории ассоциативной ионизации// Труды юбилейной конференции МЭИ, серия физическая, 1968, С.131–141.
11. Смирнов Б.М. Атомные столкновения и элементарные процессы в плазме. М., Атомиздат, 1968.
12. Киреев А.Ю. Колебательная релаксация молекул в присутствии электронного газа// Ученые записки ЦАГИ, 1981, Т.ХII, № 5, С.34–39.
13. Горелов В.А., Киреев А.Ю. Шиленков С.В. Фотоионизация воздуха перед головной ударной волной около летательного аппарата при скорости полета 6-8 км/с// Ученые записки ЦАГИ, 2012, Т. XLIII, № 5, С.15–26.
14. Gorelov V.A., Kireev A.Yu., Kildushova L.A. Ionization Particularities Behind Intensive Shock Waves in Air at Velocities of 8-15 km/s// AIAA 94-2051, 1994, Colorado Springs, June 1994.

Статья поступила в Редакцию 5 августа 2014 г.