

Investigation of Argon Radiation Characteristics behind the Front of a Strong Shock Wave

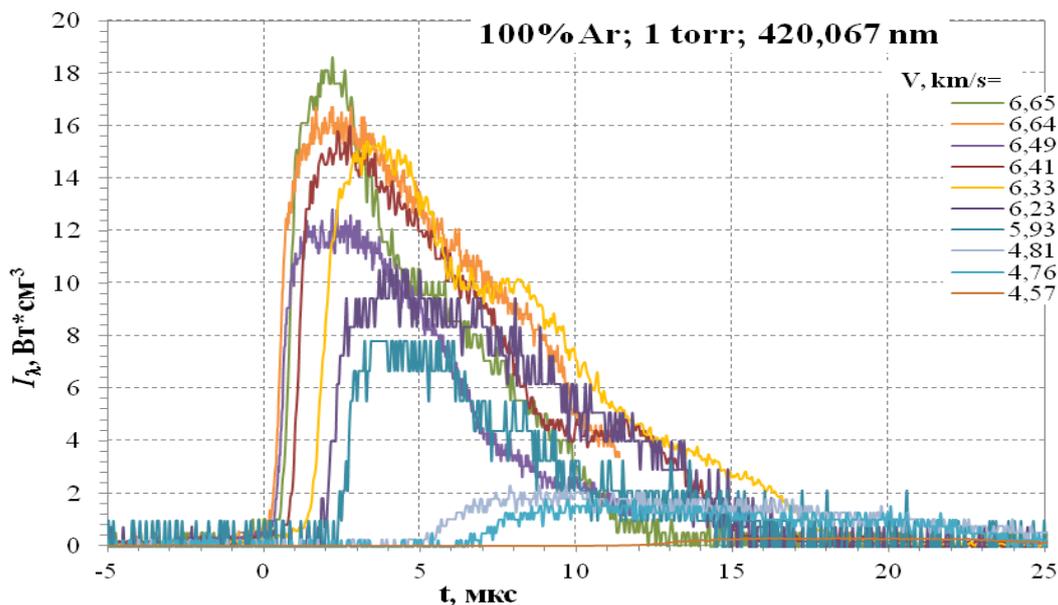
N. Bykova, I. Zabelinskii, P. Kozlov, V. Levashov, L. Ibraguimova, O. Shatalov

*Research Institute of Mechanics, Moscow State University. MV Lomonosov,
Moscow, 119192, Russia
li@imec.msu.ru*

Abstract

Experimental study of argon radiation behind the shock front is presented at velocities up to 7 km/s and the pressure ahead of the front 0.25 and 1.0 torr. Proposed algorithm allows to describe the experimentally observed temporal characteristics of the emission lines of Ar. The algorithm uses the 4-level model of Ar. The calculations assume the transition from the ground to excited state of argon to be a result of collisions Ar-Ar and Ar-e, while deactivation of the excited state occurs as a result of collisions and spontaneous emission. A simplified set of reactions is used in the simulation of argon excitation and ionization.

Keywords: shock wave, density of spectral radiation, experiment, argon, electrons, modeling of radiation.



Argon emission of wavelength 420 nm at different shock waves velocities

УДК 533.6.071+533.6.078+533.92+535.23+51.72

Исследование радиационных характеристик аргона за фронтом сильной ударной волны

Н.Г. Быкова, И.Е. Забелинский, П.В. Козлов, В.Ю. Левашов,
Л.Б. Ибрагимова, О.П. Шаталов

*Институт Механики МГУ, Россия, Москва, 119192, Мичуринский пр-т, 1
li@imec.msu.ru*

Аннотация

Выполнено экспериментальное исследование излучения аргона за фронтом ударной волны при скоростях до 7 км/с и давлении перед фронтом 0.25 тор и 1.0 тор.

Предложен алгоритм, позволяющий рассчитать наблюдаемые в эксперименте временные характеристики излучения линий Ar. В алгоритме используется 4-х уровневая модель атома Ar. В расчетах предполагается, что переход аргона из основного в возбужденное состояние реализуется в результате столкновений Ar-Ar и Ar-e, а «тушение» возбужденного состояния происходит как в результате столкновений, так и в результате спонтанного высвечивания. При моделировании процесса возбуждения и ионизации аргона используется упрощенный набор реакций.

Ключевые слова: ударные волны, спектральная плотность энергетической яркости, эксперимент, излучение, аргон, электроны, моделирование излучения.

1. Экспериментальное исследование излучения аргона

Эксперименты по исследованию временных характеристик излучения осуществлялись на экспериментальных установках, подробное описание которых представлено в [1,2]. Для расчета абсолютной интенсивности измеряемого излучения была проведена калибровка оптического канала измерения с помощью лампы с вольфрамовой нитью накала СИ10-300, тарированной на спектральную энергетическую яркость (СПЭЯ) в диапазоне длин волн 200 ÷ 1000 нм. Для расчета интенсивности излучения, относящейся непосредственно к исследуемой спектральной линии, предварительно, с помощью спектрографа Maya2000 Pro, были сняты панорамные спектры излучения УВ при разных скоростях УВ. Временные распределения интенсивности излучения были получены для чистого аргона в диапазоне скоростей ударной волны от 4 до 7 км/с и давлении перед фронтом 0.25 тор и 1.0 торр. На рис. 1 представлены осциллограммы излучения линии 420 нм при различных скоростях УВ. Везде далее результаты представлены в лабораторной системе координат. Рисунок наглядно демонстрирует изменение времени задержки появления излучения в зависимости от скорости УВ.

На рис. 2 приведен обобщающий график зависимости времени задержки начала излучения от скорости УВ, полученный из осциллограмм трех спектральных линий атома аргона 420 нм, 696.5 нм и 738 нм. Как видно из рис. 2, время задержки начала излучения уменьшается с ростом скорости ударной волны для всех рассмотренных длин волн.

Полученные экспериментальные результаты позволили, помимо времени задержки излучения, определить величину скорости нарастания излучения. Рисунок 3 демонстрирует способ определения скорости нарастания излучения по углу наклона экспериментальной осциллограммы. Обобщенный график зависимости скорости нарастания излучения от скорости ударной волны представлен на рис. 4.

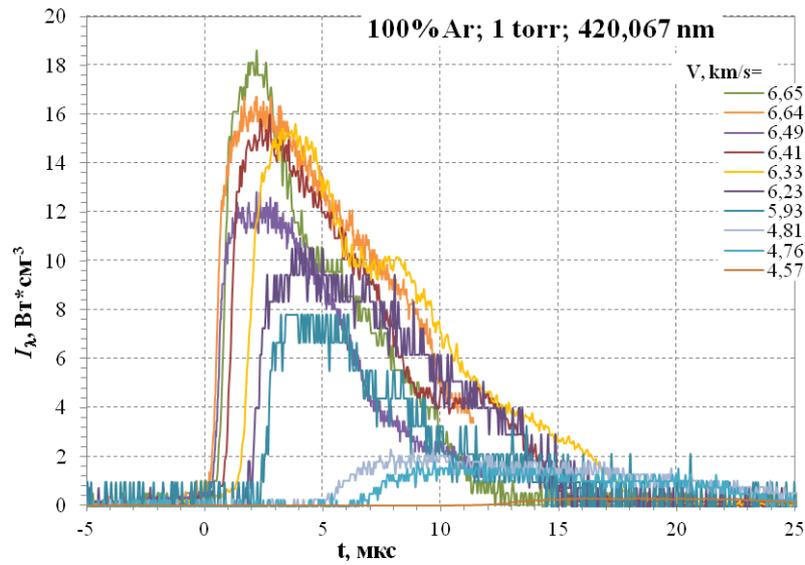


Рис. 1. Осциллограммы излучения линии 420 нм при различных скоростях УВ

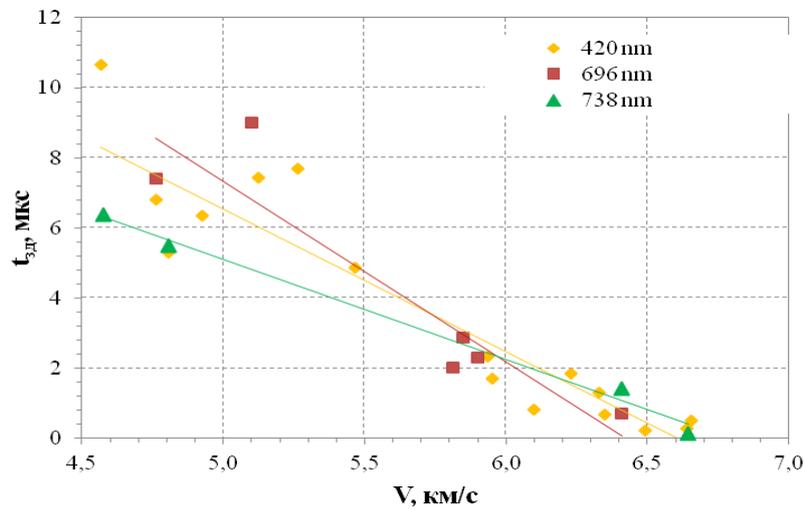


Рис. 2. Зависимость времени задержки излучения относительно газодинамического фронта от скорости УВ в чистом аргоне при начальном давлении $p_1 = 1$ торр

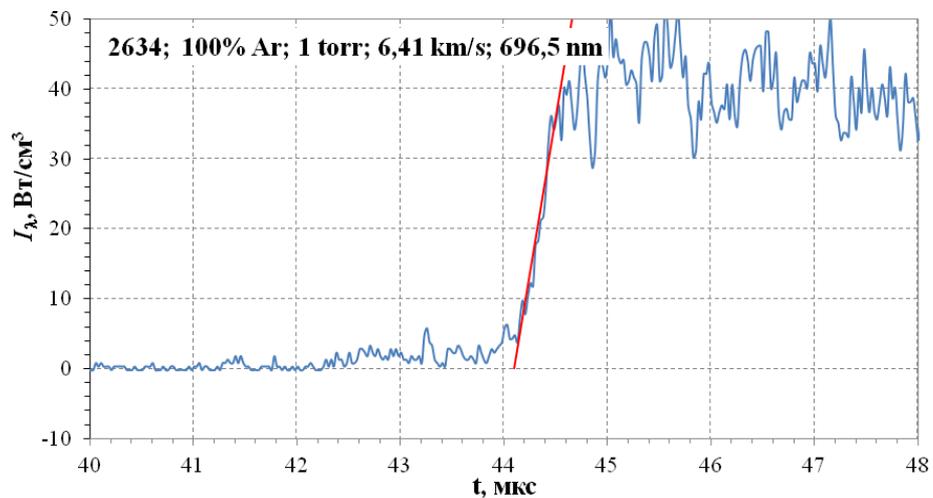


Рис. 3. Определение скорости нарастания излучения по углу наклона

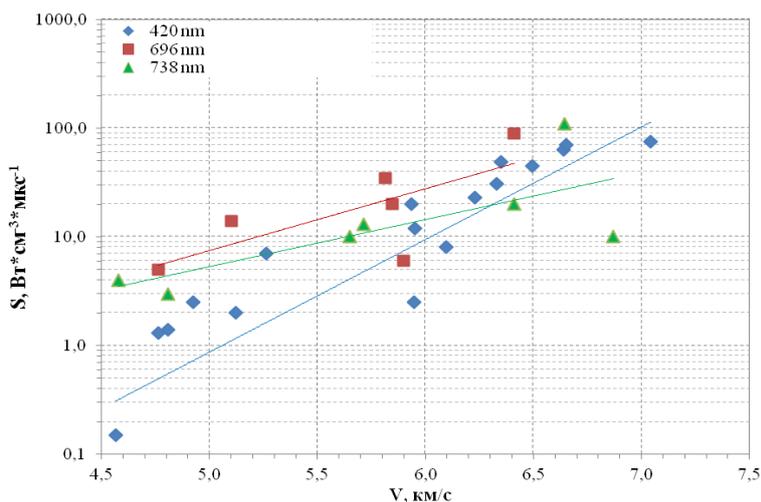
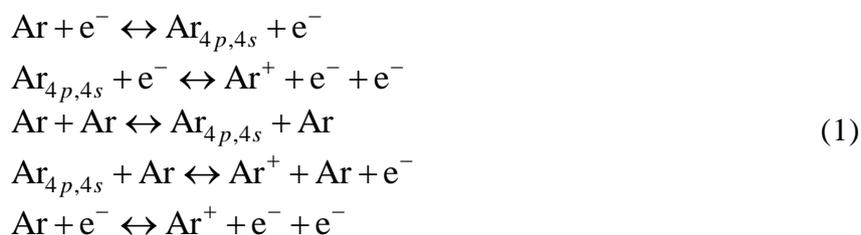


Рис. 4. Зависимость скорости нарастания излучения от скорости УВ для линий атома Ar 420, 696.5 и 738.4 нм

2. Модель излучения аргона

Для анализа экспериментальных данных, представленных в разделе 1, используется упрощенный набор реакций, не учитывающий ни тонкой структуры возбужденных уровней аргона, ни процессы многократной ионизации. Аргон моделируется как атом, имеющий четыре энергетических уровня: основной (невозбужденный) уровень – Ar; возбужденный в состоянии $4p$ – Ar_{4p} (с этого уровня наблюдается излучение в ультрафиолетовой и видимой областях спектра); возбужденный уровень $4s$, на который переходит аргон в процессе излучения – Ar_{4s} ; ион аргона – Ar^+ . Процесс «тушения» возбужденного состояния осуществляется как в результате столкновений, так и в результате спонтанного высвечивания. В рассматриваемой модели список реакций с участием аргона выглядит следующим образом:



Прямая ионизация аргона в столкновениях с атомами Ar не учитывается (пояснения см. далее в разделе 2.1).

Образование k -го компонента в результате представленных выше реакций описывается следующей системой уравнений:

$$\begin{aligned}
 \frac{dy_k}{dt} &= \frac{SP_k + SM_k}{\rho}, \quad k = 1, \dots, N_{comp} \\
 SP_k &= \sum_{j=1}^{N_{react}} K_j^f (BF_{k,j} - AF_{k,j}) \prod_{i=1}^{N_{comp}} (y_i \rho)^{AF_{i,j}} \\
 SM_k &= \sum_{j=1}^{N_{react}} K_j^r (AF_{k,j} - BF_{k,j}) \prod_{i=1}^{N_{comp}} (y_i \rho)^{BF_{i,j}}
 \end{aligned} \tag{2}$$

Здесь индексом k обозначен аргон в любой из четырех состояний и электроны. $\gamma_k = \frac{n_k}{\rho \cdot N_A}$ – мольно-массовая концентрация k -го компонента; ρ – плотность смеси, n_k – концентра-

ция k -го компонента в смеси; $BF_{k,j}, AF_{k,j}$ – стехиометрические коэффициенты для реагентов и продуктов реакции; N_{react} – число рассматриваемых в системе реакций; N_{comp} – число рассматриваемых в смеси компонентов (в рамках рассматриваемой в работе модели $N_{comp}=5$); K_j^f, K_j^r – константа прямой и обратной реакции соответственно. Члены SP_k и SM_k – описывают изменение k -го компонента в ходе прямой и обратной реакции [3].

Следуя работе [4], учет изменения мольно-массовой концентрации аргона в состояниях 4p (Ar_{4p}) и 4s (Ar_{4s}) за счет спонтанного высвечивания – реакция $Ar_{4p} \rightarrow Ar_{4s} + h\nu$ – осуществляется добавлением к системе уравнений (2) дополнительных членов, имеющих следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{dy_{Ar_{4p}}}{dt} &= \frac{SP_{Ar_{4p}} + SM_{Ar_{4p}}}{\rho} - \frac{y_{Ar_{4p}}}{\tau} \\ \frac{dy_{Ar_{4s}}}{dt} &= \frac{SP_{Ar_{4s}} + SM_{Ar_{4s}}}{\rho} + \frac{y_{Ar_{4p}}}{\tau} \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь τ – время жизни возбужденного состояния. Более подробно величина времени жизни возбужденного состояния будет обсуждаться далее.

Параметры газа за фронтом ударной волны с учетом химических реакций и потерь энергии на излучение определяются с использованием стандартных уравнений сохранения и уравнения состояния:

$$\begin{aligned} \rho_1 V &= \rho_2 v_2, & P_1 + \rho_1 V^2 &= P_2 + \rho_2 v_2^2, \\ P &= \rho \cdot RT \sum_i \gamma^{(i)}, & \frac{1}{\mu} &= \sum_i \gamma^{(i)} \\ \sum_i \gamma_1^{(i)} H_1^{(i)} + \frac{1}{2} V^2 &= \sum_i \gamma_2^{(i)} H_2^{(i)} + \frac{1}{2} v_2^2 - q \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь V – скорость ударной волны; v_2 – скорость потока газа относительно фронта ударной волны; T, P и ρ – температура газа, давление и плотность; μ – молярная масса смеси; H – энтальпия. Состояние газа обозначается индексом 1 перед фронтом ударной волны и 2 за фронтом. q – энергия, теряемая за счет излучения, отнесенная к единице массы газа.

2.1. Константы скоростей реакций

В литературе представлены различные выражения для констант скорости реакции **возбуждения аргона электронным ударом**: $Ar + e^- \leftrightarrow Ar_{4p,4s} + e^-$. В работе [5] эта константа имеет следующий вид:

$$K = 2 \times 10^8 T_e^{3/2} \left(\frac{E_{mn}}{T_e} + 2 \right) \exp \left(-\frac{E_{mn}}{T_e} \right), \frac{\text{см}^3}{\text{моль} \cdot \text{с}} \quad (5)$$

В работе [6] приведено следующее выражение для константы скорости:

$$K = 6.02 \times 10^{15} T_e^{0.1} \exp \left(-\frac{E_{mn}}{T_e} \right), \frac{\text{см}^3}{\text{моль} \cdot \text{с}} \quad (6)$$

Здесь T_e – температура электронного газа; E_{mn} – энергия образования соответствующего возбужденного состояния в градусах К. Средняя энергия образования состояния 4p (Ar_{4p}) – 13.24 эВ. Средняя энергия образования состояния 4s (Ar_{4s}) – 11.62 эВ.

На рис. 5 приведено сравнение констант (5) и (6) в диапазоне температур от 5000 К до 60000 К для случая перехода аргона на уровень $4p$. Из представленного графика видно, что в рассмотренном диапазоне температур величины констант отличаются незначительно.

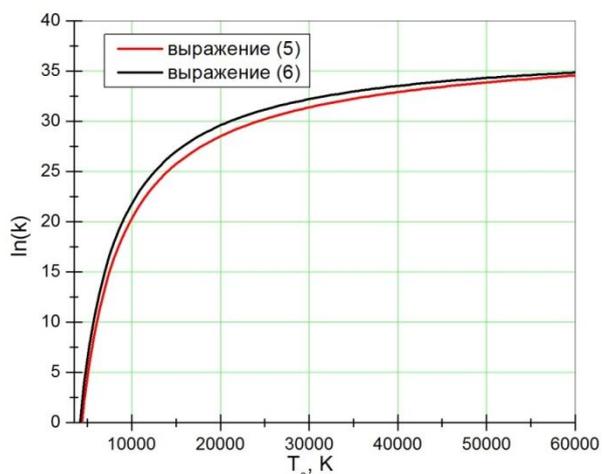


Рис. 5. Сравнение констант скорости реакции $\text{Ar} + e^- \leftrightarrow \text{Ar}_{4p} + e^-$

При рассмотрении процесса **ионизации аргона электронным ударом** из возбужденного состояния (реакция $\text{Ar}_{4p,4s} + e^- \leftrightarrow \text{Ar}^+ + e^- + e^-$) и основного состояния (реакция $\text{Ar} + e^- \leftrightarrow \text{Ar}^+ + e^- + e^-$) используется следующее выражение для константы скорости [7]:

$$K = \exp\left(-\frac{E_{mn}}{T_e}\right) \left(\frac{T_e}{E_{mn}}\right)^{1/2} \sum_{n=0}^5 a_n \left(\lg\left(\frac{T_e}{E_{mn}}\right)\right)^n, \left[\frac{\text{см}^3}{\text{с}}\right] \quad (7)$$

$$a_0 = 9.4727 \times 10^{-8}; \quad a_1 = 1.491 \times 10^{-9}; \quad a_2 = -5.9294 \times 10^{-8};$$

$$a_3 = 1.7977 \times 10^{-8}; \quad a_4 = 1.2962 \times 10^{-8}; \quad a_5 = -9.7203 \times 10^{-9}$$

Здесь E_{mn} – энергия образования (т.е. разность потенциала ионизации из основного состояния и энергии соответствующего уровня) соответствующего состояния в градусах Кельвина; T_e – температура.

В работе [8] приведены данные по сечению ионизации аргона в столкновениях с атомами аргона в основном состоянии. Аппроксимация этой константы приведена в приложении 1 (выражение П.2). На рис. 6 представлено сравнение константы ионизации аргона в результате столкновения с атомами аргона (П.2) и с электронами (7).

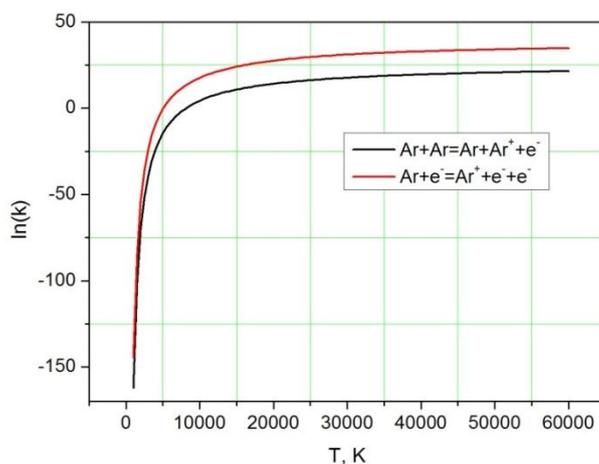


Рис. 6. Сравнение констант скорости ионизации аргона

Из рисунка видно, что скорость образования ионизованного аргона за счет столкновений с электронами значительно больше, чем при столкновении с атомами аргона. Следовательно процесс ионизации аргона в столкновениях с атомами Ar можно не учитывать. Так, например, для температуры $T = 15000$ К константы скорости различаются более чем в 10^5 раз.

Используя данные работы [8] константу скорости **возбуждения аргона из основного состояния в результате столкновения с аргоном** (реакция $Ar + Ar \leftrightarrow Ar_{4p,4s} + Ar$) можно представить в следующем виде:

$$K = 8.4 \times 10^9 \cdot T^{1/2} \left(E_{mn}^{(\text{эВ})} \right)^{-2.26} \left(E_{mn}^{(\text{эВ})} + 1.7 \times 10^{-4} T \right) \exp \left[-\frac{E_{mn}^{(K)}}{T} \right], \frac{\text{см}^3}{\text{моль} \cdot \text{с}} \quad (8)$$

Здесь T – температура в градусах К; $E_{mn}^{(\text{эВ})}$ – энергия состояния в эВ, $E_{mn}^{(K)}$ – энергия образования состояния в К.

В нескольких работах приводится следующая величина константы скорости **ионизации аргона из возбужденного состояния за счет столкновения с аргоном** (реакция $Ar_{4p,4s} + Ar \leftrightarrow Ar^+ + Ar + e^-$):

$$K = 5.0 \times 10^{-10} \frac{\text{см}^3}{\text{с}} = 3.0 \times 10^{14} \frac{\text{см}^3}{\text{моль} \cdot \text{с}} \quad (9)$$

Следует отметить, что в работе [9] константа скорости этой реакции не приводится, даётся лишь отсылка к результатам табулированных расчетов работы [10]. В работах [6, 11] константа (9) приводится со ссылкой на работу [12], которая, в свою очередь ссылается на [6]. В работе [8] представлено выражение для сечения этой реакции, используя которое можно получить следующую величину константы скорости ионизации аргона из возбужденного состояния за счет столкновения с аргоном (см. приложение 1):

$$k = 5.4641 \times 10^{10} T^{1/2} \left(\frac{13.6}{I_i} \right)^2 \cdot e^{-I_i/k_B T} \left[\frac{3}{2} + \frac{k_B T}{I_i} + \frac{I_i}{k_B T} \right], \frac{\text{см}^3}{\text{с} \cdot \text{моль}}$$

Для случая, когда $I_{4p} = 2.52 \text{эВ}$, $I_{4s} = 4.14 \text{эВ}$ имеем следующие выражения:

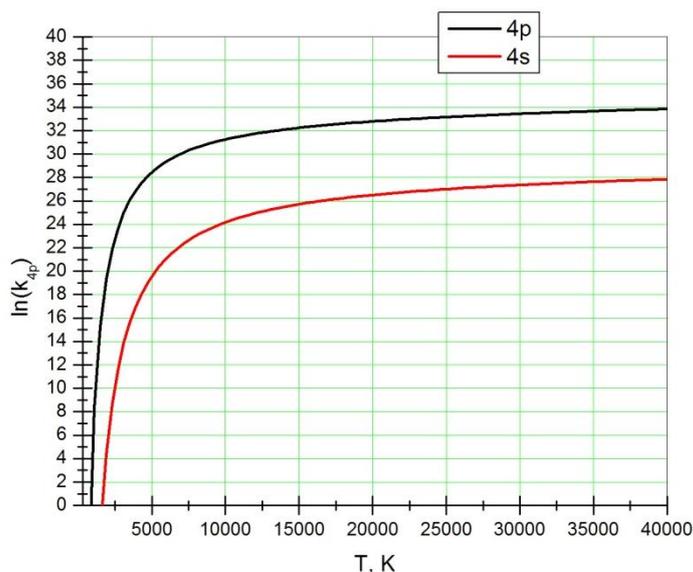
$$K_{4p} = 15.914 \times 10^{11} T^{1/2} \cdot e^{-0.2924 \times 10^5 / T} \left[1.5 + 3.419 \times 10^{-5} T + \frac{0.2924 \times 10^5}{T} \right], \frac{\text{см}^3}{\text{с} \cdot \text{моль}}$$

$$K_{4s} = 5.8965 \times 10^9 T^{1/2} \cdot e^{-0.48045 \times 10^5 / T} \left[1.5 + 2.0814 \times 10^{-5} T + \frac{0.48045 \times 10^5}{T} \right], \frac{\text{см}^3}{\text{с} \cdot \text{моль}}$$

На рис. 7 приведены графики соответствующих констант скорости.

2.2. Константы скоростей обратных реакций. Приведенная энергия Гиббса –Ф

При моделировании, константа обратной реакции рассчитывается через константу равновесия химической реакции [13]. Для нахождения этой величины использовались данные работы [14] для констант равновесия или соответствующие аппроксимации Ф приведенной энергии Гиббса. В [14] представлены данные для величин Ф в интервале температур $100 \div 20000$ К. Для случая более высоких температур такие данные отсутствуют. Используя подход, предложенный в [13], были получены соответствующие аппроксимации для Ф.


 Рис. 7. Константы скорости реакции $\text{Ar} + \text{Ar} \leftrightarrow \text{Ar}_{4p,4s} + \text{Ar}$

2.2.1 Аргон в основном состоянии (Ar)

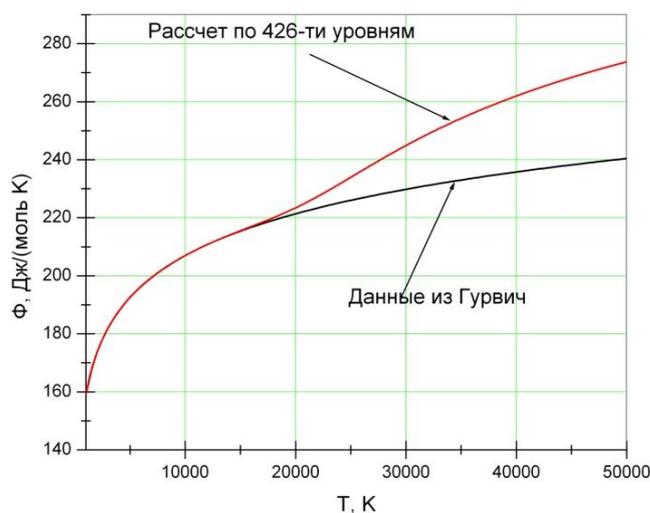
Статистическая сумма по внутримолекулярным состояниям атомов и одноатомных ионов является суммой по их электронным состояниям:

$$Q_{\text{внутр}}(T) = \sum_{i=0}^{i_{\text{max}}} p_i \exp\left[-\frac{hc}{kT} T_i\right], \quad (10)$$

где T_i – энергия i -го электронного состояния атома (в см^{-1}), отсчитанная от его основного состояния. Для i -го электронного состояния, характеризуемого квантовым числом полного момента количества движения J , статистический вес равен $p_i = 2J + 1$.

Для величин T_i и J используются данные, представленные в NIST [15].

В расчетах статистической суммы по внутримолекулярным состояниям аргона использовались данные из NIST о 426 электронных состояниях. Результаты расчета и сравнения с данными из [14], где использовалась информация о 13-ти электронных состояниях, представлены на рис. 8.


 Рис. 8. Сравнение величины приведенной функции Гиббса атомов Ar, рассчитанной с учетом различного набора электронных состояний. Черная линия в интервале для $T > 20000$ К – экстраполяция выражения [13]

2.2.2 Ионизованный аргон (Ar^+)

В расчетах статистической суммы по внутренним состояниям ионизованного аргона использовались данные из NIST о 416 электронных состояниях. Результаты расчета и сравнения с экстраполяцией (для $T > 20000$ К) данных из [14], где использовалась информация о 9-ти электронных состояниях, представлены на рис. 9.

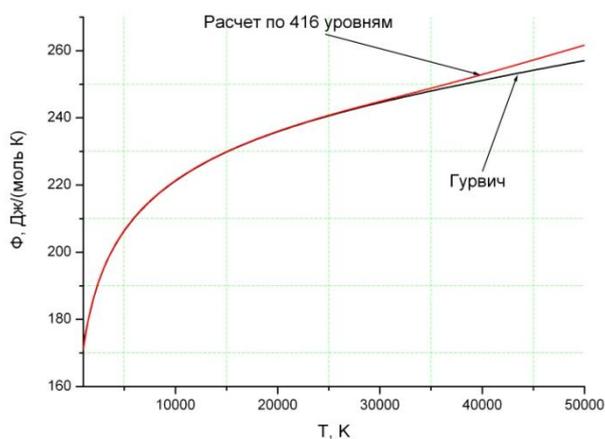


Рис. 9. Сравнение данных по величинам приведенной функции Гиббса иона Ar^+ , рассчитанных с использованием различных наборов электронных состояний и данных [14]

Из рисунка видно, что даже в области высоких температур (50000 К) различия не превышают 3 %.

На рис. 10 представлено сравнение аппроксимации, предлагаемой в [14], продленной в область температур выше 20000 К, а также расчетов по различному числу электронных состояний (9 – черная линия и 416 – бирюзовая линия).

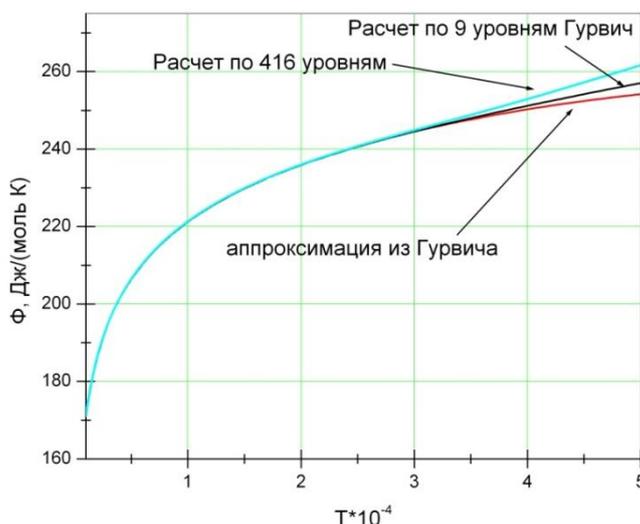


Рис. 10. Сравнение различных данных по величинам приведенной функции Гиббса иона Ar^+

Из рисунка видно, что при высоких температурах различия составляют примерно 3 %. В связи с этим, в настоящих расчетах, во всем диапазоне температур, будем использовать аппроксимацию, предлагаемую в [14].

В [16] для реакций возбуждения аргона из основного состояния за счет столкновений с электронами и аргоном в основном состоянии (реакция $\text{Ar} + M \leftrightarrow \text{Ar}_{4p,4s} + M$, $M = \text{Ar}, e^-$) приводится следующее выражение для константы скорости обратной реакции:

$$k_{ji}^{dex} = k_{ij}^{exc} \frac{g_i}{g_j} \exp\left(\frac{\varepsilon_{ij}}{k_B T}\right)$$

Здесь $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_j - \varepsilon_i$ – разница энергий между верхним и нижним уровнем энергии; g_i, g_j – статистический вес соответствующего состояния.

Для процесса рекомбинации и ионизации в работе [16] приводится следующее выражение для константы скорости обратной реакции:

$$k_i^{rec} = k_i^{ion} \frac{g_i}{g_+} \frac{1}{2} \left(\frac{h^2}{2\pi m_e k_B T_e} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{I_i}{k_B T}\right)$$

Здесь I_i – потенциал ионизации i -го возбужденного состояния.

2.3. Учет изменения температуры электронного газа

При расчете процессов за фронтом ударной волны возможны условия, при которых температура электронов не равна температуре горячих частиц [17]. Для определения температуры электронного газа использовалось следующее выражение [3, 17, 18]:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{3}{2} X_e \times T_e \right) = Q_{ei} + Q_{ea} + Q_{ion} \quad (12)$$

Источниковые слагаемые описывают следующие процессы обмена: Q_{ei} – упругие электронно-ионные столкновения; Q_{ea} – упругие электронно-атомные столкновения; Q_{ion} – ионизации атомов электронным ударом. Соответствующие выражения приведены ниже.

Упругие электрон-ионные столкновения

$$Q_{ei} = 5.38 \times 10^{21} X_i X_e \frac{T - T_e}{A T_e^{3/2}} \Lambda \quad (13)$$

Здесь $\Lambda = \ln \left[\frac{3}{2\sqrt{\pi}} \frac{(kT_e)^{3/2}}{e^3 n_e^{1/2}} \right]$ – кулоновский логарифм;

$e = 4.8 \times 10^{-10} \text{ Г}^{1/2} \text{ см}^{3/2} / \text{с}$ – заряд электрона; $k = 1.38 \times 10^{-16} \text{ эрг/К}$ – постоянная Больцмана; n_i, n_e – концентрации ионов и электронов (см^{-3}); T_e, T – температуры электронов и газа соответственно в К; $m_e = 9.1 \times 10^{-28} \text{ Г}$ – масса электрона; X_i, X_e – мольно-объемные концентрации ($\text{моль} \cdot \text{см}^{-3}$) ионов и электронов соответственно; A – атомная масса иона.

Упругие электрон - атомные столкновения

$$Q_{ea} = 3.378 \times 10^{10} X_e X_a \sqrt{T_e} (T - T_e) \left[1 - \left(1 + \frac{T_e}{T_a^*} \right)^{-1} \right] \quad (14)$$

Ионизация электронным ударом

Источниковый член выглядит следующим образом:

$$Q_{ion} = - \sum_{i=1}^{N_{ion}} \gamma_i E_{ion,i} K_i^f X_{a,i} X_e \quad (15)$$

Здесь γ_i – коэффициент, позволяющий на эмпирическом уровне учесть ступенчатость процесса ионизации (в литературных источниках этот коэффициент изменяется от 0.1 до 1. В настоящей работе полагается равным 1); $E_{ion,i}$ – энергия ионизации атома; K_i^f – константа скорости соответствующей реакции.

2.4. Учет потерь на излучение

Как отмечалось выше, параметры газа за фронтом ударной волны с учетом химических реакций и потерь энергии на излучение определяются с использованием системы уравнений (4). Последнее уравнение этой системы содержит слагаемое q , посредством которого осуществляется учет влияния излучения на параметры газа за фронтом ударной волны. В работе [19] вводится выражение для скорости потери лучистой энергии – Q_R , состоящее из скоростей потери энергии равновесного излучения – Q_C и излучения в линиях – Q_B . В [19] отмечается, что равновесное излучение в плазме вызвано процессами рекомбинации (свободно - связанными переходами) и свободно-свободными переходами. В предположении локального температурного равновесия, Q_C выглядит следующим образом [20]:

$$Q_C = \frac{64\pi^{3/2} e^6 n_e^2}{3 \times \sqrt{6} m_e^{3/2} c^3 h \sqrt{kT_e}} (h\nu_c + kT) \bar{g} Z_{eff}^2 \quad (16)$$

Здесь e – заряд электрона; h – постоянная Планка; c – скорость света; ν_c – предельная частота; \bar{g} – фактор Гаунта, учитывающий квантовые эффекты и частичное экранирование ядра электронами и Z_{eff} – эффективный заряд ядра.

В [20] принимается, что $\bar{g} = 1$, $Z_{eff}^2 = 1.5$. В [21] $Z_{eff}^2 = 1.67$. Здесь же отмечается, что эта величина наиболее вероятна в диапазоне $T_e = 10500 \div 12500$ К и $n_e = 0.4 \div 1.7 \times 10^{17}$ см⁻³. В [20] в качестве ν_c предлагается величина 2.85 эВ, соответствующая переходу из ионизационного состояния на уровень $4p$.

В [19] приводится следующее выражение для Q_B :

$$Q_B = \sum_k n_a(k) A_{k,k-1} (E_k - E_{k-1}) \exp\left[-\frac{E_k - E_{k-1}}{kT_e}\right], \quad (17)$$

где E_k – энергия k -го возбужденного состояния атома; $n_a(k)$ – числовая плотность атомов в k -м возбужденном состоянии; $A_{k,k-1}$ – коэффициенты Эйнштейна, характеризующие вероятность радиационного перехода.

2.5. Тестирование предложенной модели

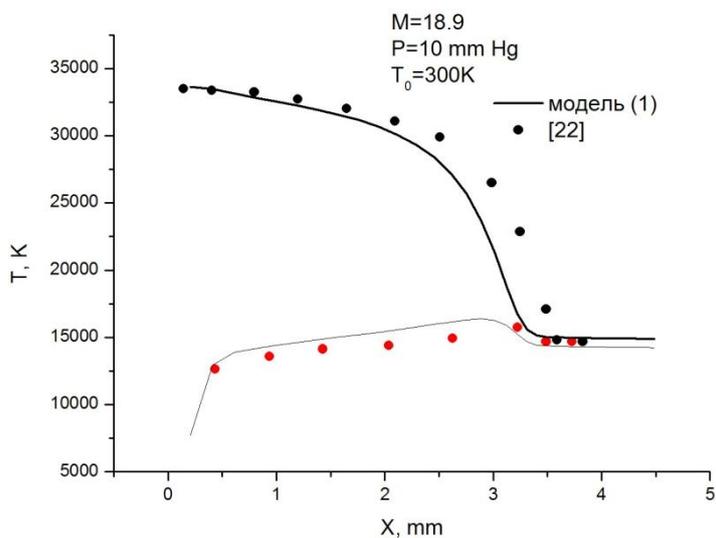
Для проверки правильности работы программы и тестирования алгоритма расчета проводилось сравнение результатов работы программы с некоторыми данными, представленными в литературе. Некоторые результаты представлены на рис. 11.

Из рисунка видно, что предлагаемая в работе упрощенная модель, позволяет с удовлетворительной точностью описывать изменение во времени температуры газа и температуры электронов за фронтом ударной волны. Также наблюдается удовлетворительное согласование данных по концентрациям электронов. Сравнение результатов проводилось для различных скоростей ударной волны и начальных давлений.

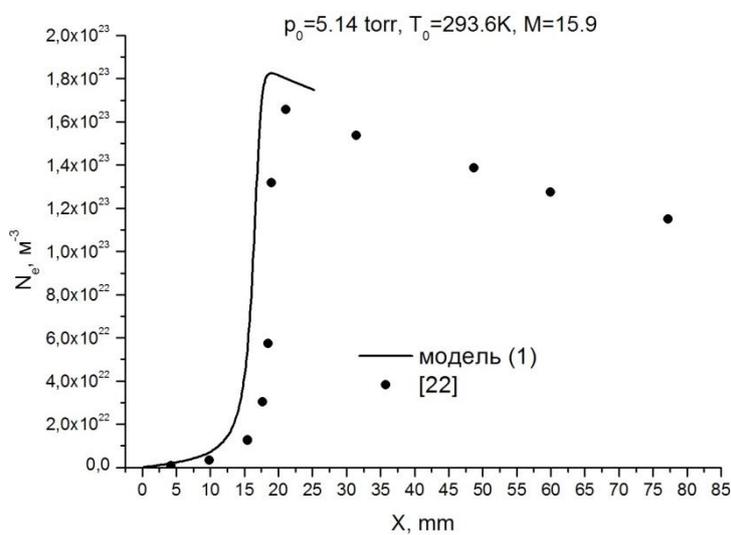
3. Результаты расчетов

По предложенной выше схеме осуществлялись расчеты параметров аргона за фронтом ударной волны. Результаты расчетов сравнивались с данными работы [22].

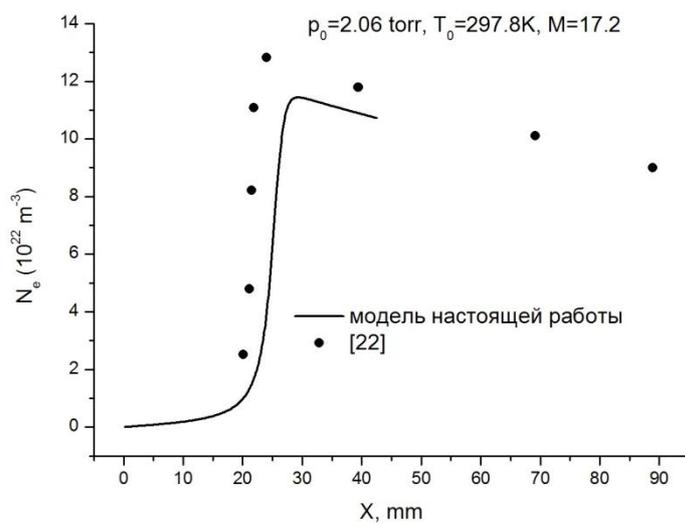
Для учета скорости изменения концентрации аргона в излучающем состоянии за счет спонтанного высвечивания необходима величина времени жизни возбужденного состояния – τ . Обсуждение подхода к вычислению данной величины, используемого в работе, представлено в Приложении 2. При анализе экспериментальных данных о населенности возбужденного состояния использовано предположение об оптически тонком слое газа. Обсуждение этого вопроса представлено в приложении.



А)



Б)



В)

Рис. 11. Сравнение расчетов по упрощенной модели с результатами [22]

Одним из важных явлений, наблюдаемых в эксперименте, является время задержки начала излучения после прохождения ударной волны. На рис. 12 представлены сравнения величины времени задержки излучения линии аргона 696.5 нм, полученные при различных скоростях ударной волны и начальном давлении в 1 Торр. Представленные результаты были получены на различных экспериментальных установках (эксперимент 1 – зеленые сплошные кружки и эксперимент 2 – красные квадраты). Пустыми зелеными кружочками представлены данные по времени задержки излучения, определенные в результате расчета по модели, предлагаемой в работе. Сплошная красная линия – результат аппроксимации данных эксперимента 1. Из рисунка видно, что между экспериментальными и расчетными данными имеется удовлетворительное согласование. Следует отметить, что с точки зрения расчетного подхода, время начала излучения в большей степени определяется скоростью возникновения электронов в результате столкновений Ar-Ar. Таким приведенные графики могут быть использованы для корректировки величины константы соответствующих реакций.

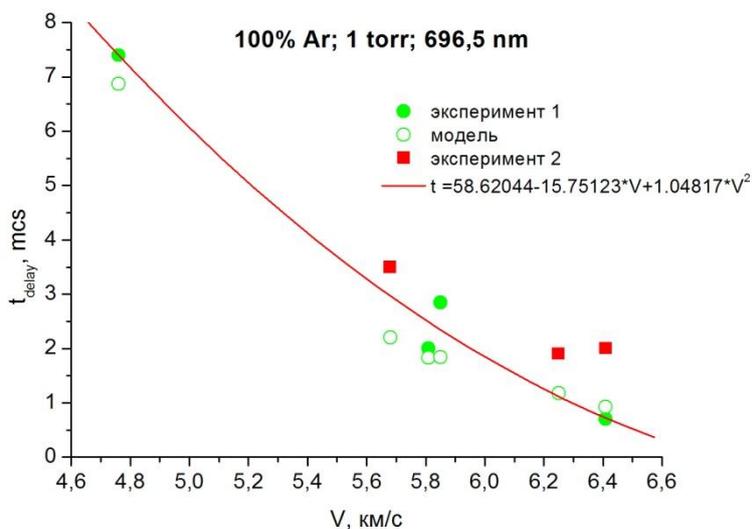


Рис. 12. Время задержки излучения

На следующем рисунке (рис. 13) представлены сравнения результатов расчета и эксперимента по времени нарастания излучения. Из рисунка видно, что время нарастания излучения, вычисленное по экспериментальным данным, больше, чем соответствующая расчетная величина для всех скоростей ударной волны.

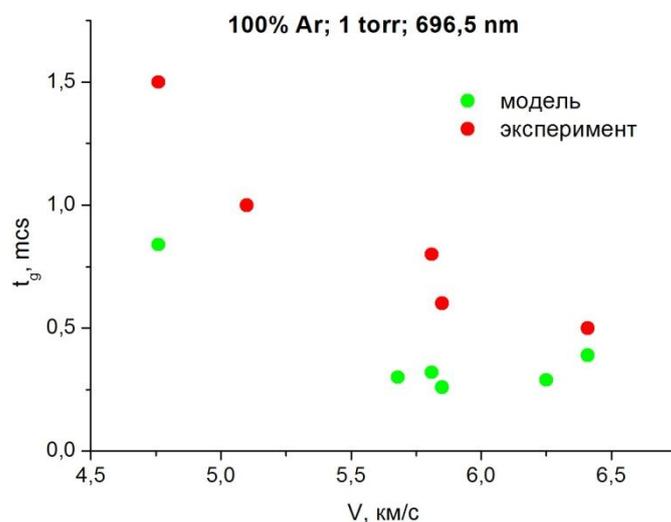


Рис. 13. Время нарастания излучения

Различия в определении данной величины составляет около 60%. Следует отметить, что появление излучения связано с появлением свободных электронов. Таким образом, полученные данные позволяют произвести корректировку констант, отвечающих за образования возбужденного состояния аргона за счет столкновений с электронами.

На рис. 14 и 15 представлены сравнения по времени задержки излучения (рис. 14) и времени нарастания излучения (рис. 15). Представленные на этих рисунках данные являются результатом обработки большого числа экспериментальных данных, полученных на различных экспериментальных установках и в широком диапазоне начальных параметров и скоростей ударной волны.

Из рис. 14 видно, что предлагаемая в работе расчетная модель позволяет получить удовлетворительное согласие с результатами экспериментов. В тоже время, как видно из рис. 15 наблюдается небольшое занижение величины времени нарастания излучения по сравнению с результатами экспериментальных наблюдений [24-26].

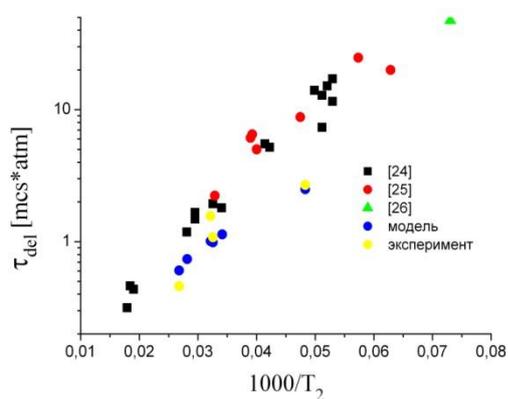


Рис. 14. Сравнение расчетов по задержке излучения с имеющимися экспериментальными данными

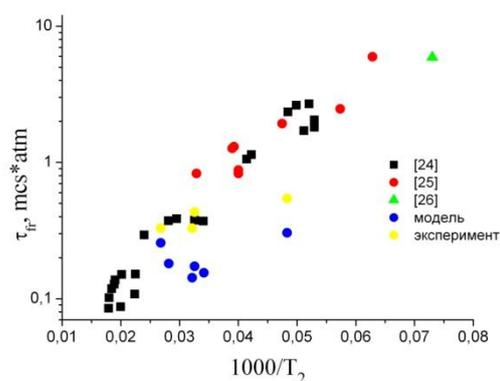


Рис. 15. Сравнение расчетов по времени нарастания излучения с экспериментальными данными

Выводы

Предложенный в работе упрощенный подход, моделирующий атом аргона как атом, имеющий четыре энергетических уровня – (1) основной (невозбужденный) уровень, (2) возбужденный в состоянии $4p$, с которого наблюдается излучение в ультрафиолетовой и видимой областях спектра, (3) возбужденный уровень в состоянии $4s$, на который имеет место переход с уровня $4p$ для линий 696.5 и 738 нм, и (4) ион аргона, был использован для проведения предварительных расчетов характеристик аргона за фронтом ударной волны при скоростях до 7 км/с и давлении перед фронтом ударной волны $0.25 \div 1.0$ тор.

При рассмотрении процесса «тушения» возбужденного состояния в результате спонтанного высвечивания необходимо корректное определение времени жизни излучающего состояния. Традиционно применяемая в расчетах радиационной газодинамики концепция убыли возбужденных состояний за счет спонтанного излучения со скоростью, определяемой коэффициентами Эйнштейна, по-видимому, не всегда справедлива, особенно при большой концентрации электронов. В работе предложено, для определения времени жизни возбужденного состояния использовать величину обратно пропорциональную ширине фойгтовского профиля линии.

Представленный набор реакций, и соответствующие константы скоростей реакций позволяют рассчитать время задержки начала излучения и скорость нарастания излучения, совпадающее с удовлетворительной точностью с экспериментальными данными.

Представленные экспериментальные данные по времени задержки излучения и скорости нарастания излучения могут быть использованы для уточнения констант скорости соответствующих реакций.

Приложение 1

Константа скорости ионизации при столкновении с аргоном в основном состоянии. (Реакция $\text{Ar} + \text{Ar} \leftrightarrow \text{Ar}^+ + \text{Ar} + \text{e}^-$)

В [8] приведено следующее выражение для сечения этой реакции:

$$\sigma = 1.8 \times 10^{-25} (\varepsilon - 15.76)^{1.3}, \text{ м}^2$$

Для вычисления константы скорости образования используется следующее выражение:

$$k = \left(\frac{8k_B T}{\pi \mu} \right)^{1/2} \frac{1}{(k_B T)^2} \int_{\varepsilon_0}^{\infty} \sigma(\varepsilon) \varepsilon e^{-\varepsilon/k_B T} d\varepsilon \quad (\text{П.1})$$

Здесь ε_0 – пороговая энергия.

Аппроксимируя результаты вычисления по выражению (П.1) при помощи полинома, константу данной реакции можно представить в следующем виде:

$$k = 4.87 \times 10^6 - 3.16 \times 10^2 \cdot T + 0.54 \cdot T^2 - 3.44 \times 10^{-5} \cdot T^3 + 7.63 \times 10^{-10} \cdot T^4 - 7.39 \times 10^{-16} \cdot T^5 - 3.21 \times 10^{-20} \cdot T^6, \left(\frac{\text{см}^3}{\text{моль} \cdot \text{с}} \right) \quad (\text{П.2})$$

Константа скорости ионизации из возбужденного состояния при столкновении с аргоном. (Реакция $\text{Ar}_{4p,4s} + \text{Ar} \leftrightarrow \text{Ar}^+ + \text{Ar} + \text{e}^-$)

В [8] приведено следующее выражение для сечения этой реакции:

$$\sigma_i^a(\varepsilon) = 4\pi a_0^2 \left(\frac{I_H}{I_i} \right)^2 \frac{2m_e}{m_H} \xi^2 \frac{\varepsilon/I_i - 1}{\left(1 + \frac{2m_e}{m_{\text{Ar}}} (\varepsilon/I_i - 1) \right)^2}$$

Для вычисления константы скорости образования используется выражение (П.1). Вводя обозначения, можно выражение для сечения преобразовать к следующему виду:

$$\sigma_i^a(\varepsilon) = A \frac{\varepsilon/I_i - 1}{\left[1 + B(\varepsilon/I_i - 1) \right]^2},$$

$$\text{где } A = 4\pi a_0^2 \left(\frac{I_H}{I_i} \right)^2 \frac{2m_e}{m_H} \xi^2, \quad B = \frac{2m_e}{m_{\text{Ar}}}$$

Тогда

$$k = \left(\frac{8k_B T}{\pi \mu} \right)^{1/2} \frac{1}{(k_B T)^2} \int_{\varepsilon_0}^{\infty} A \frac{\varepsilon/I_i - 1}{\left[1 + B(\varepsilon/I_i - 1) \right]^2} \varepsilon e^{-\varepsilon/k_B T} d\varepsilon$$

Вычисляя интеграл с учетом того, что $B = 2m_e/m_{Ar} \rightarrow 0$), можно получить следующее выражение для константы скорости ионизации из возбужденного состояния:

$$k = 5.4641 \times 10^{10} T^{1/2} \left(\frac{13.6}{I_i} \right)^2 \cdot e^{-I_i/k_B T} \left[\frac{3}{2} + \frac{k_B T}{I_i} + \frac{I_i}{k_B T} \right], \frac{\text{см}^3}{\text{с} \cdot \text{моль}},$$

где I_i – потенциал ионизации в эВ.

Приложение 2

Время жизни возбужденного состояния

В кинетической модели при определении параметров течения газа в условиях больших скоростей ударной волны и особенно величины излучаемой мощности большую роль играет время жизни возбужденного состояния атома. Его величина, наряду с другими константами скорости реакций, используемых в модели, определяет скорость изменения и значение заселенности излучающего уровня энергии атома.

Интенсивность излучения атомарной линии характеризуется электронным переходом (с уровня i на уровень k) со своими свойствами – силой линии, коэффициентами Эйнштейна, населенностью излучающего уровня и т.д.

Для спонтанного излучения время жизни определяется величиной, обратной коэффициенту Эйнштейна: $\tau = (A_{ik})^{-1}$. В [21] аналогичное соотношение выводится для излучения в газе конечной плотности:

$$\tau_1 = (\gamma + \Gamma)^{-1}$$

Здесь γ – радиационная ширина для спонтанного излучения; Γ – уширение линии за счет тушащих столкновений с соседними атомами, в результате чего возбужденный атом испытывает безызлучательный переход на нижний уровень. Действие таких столкновений приводит к уширению линии: если число эффективных столкновений за 1 сек есть Γ , то время жизни возбужденного состояния укорачивается вследствие увеличения общего числа переходов $(\gamma + \Gamma)$ в единицу времени.

Связь между шириной линии и временем жизни возбужденного уровня можно понять из соотношения неопределенности для энергии и времени: $\Delta E \cdot \Delta t \sim h$.

В условиях плазмы наиболее сильное влияние атом испытывает при взаимодействии с электронами и ионами. Это приводит к смещению и расщеплению возбужденных уровней (эффект Штарка), вследствие чего происходит эффективное уширение линии.

Теоретическая трактовка уширения Штарка представляет значительные трудности из-за сложности процессов взаимодействия, меняющегося во времени при столкновении. Две основные теории уширения спектральных линий – ударная и статистическая. Условия применимости ударной теории – сильное взаимодействие в течение очень малого времени – практически всегда выполняются при столкновении тяжелых частиц с электронами, которые в силу их малой массы движутся, при той же кинетической энергии, с гораздо большими скоростями. Вследствие того, что время между столкновениями может быть очень малым ($\tau_{ст} \sim 10^{-11}$ с), уширение может быть весьма значительным (порядка десятых долей ангстрема). Как отмечается в [21], время испускания, соответствующее уширенной линии, определяется временем между столкновениями. Таким образом, в условиях плазмы дезактивация возбужденного состояния происходит с большей скоростью, т.е. время жизни τ_2 уровня укорачивается по сравнению с временем жизни τ и τ_1 .

Как известно, естественное уширение линии порядка 10^{-4} Å, столкновения в газе могут привести к ее уширению в десятки раз. В условиях нашего эксперимента (концентрация

электронов $N_e \sim 4 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$) штарковское уширение для линий 696.5 и 738 нм составляют около 0.5 Å.

Полагаем, что уширение линии в плазме отражает среднее время между столкновениями и определяется в каждый момент времени параметрами течения газа в ударной волне. В расчетах для определения реального значения скорости убыли атомов с возбужденного уровня за счет излучения, в кинетическом уравнении предлагается соотношение

$$\tau_2 = (2\alpha\pi\gamma_v)^{-1} \quad (\text{П.3})$$

Здесь γ_v – ширина фойгтовского профиля линии, рассчитываемая за фронтом ударной волны в зависимости от изменения параметров газа и всех возможных уширений [23, 27, 28]:

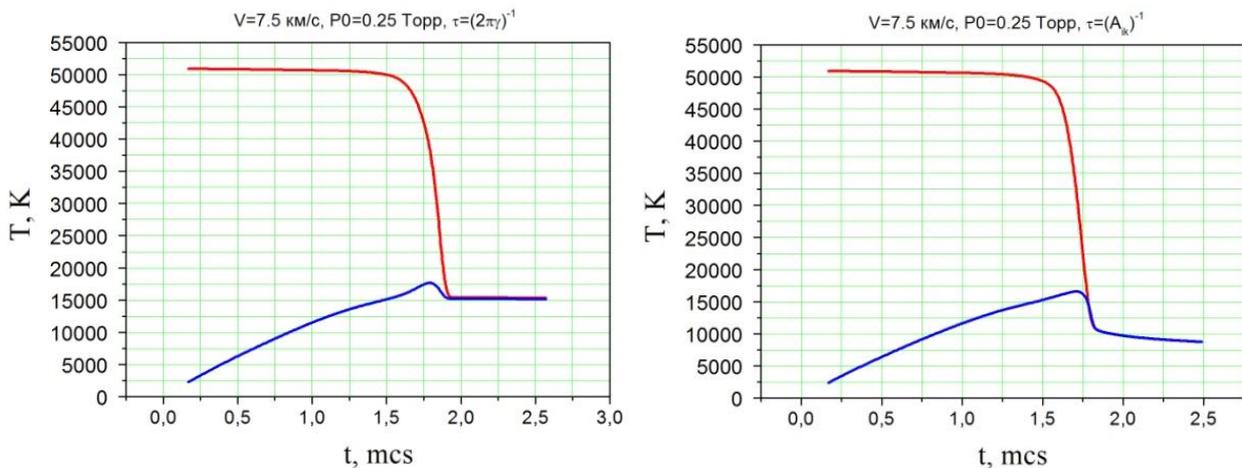
$$\gamma_v = \frac{1}{2} \left(\Delta v_\Lambda + \sqrt{\Delta v_\Lambda^2 + 4\Delta v_D^2} \right) + 0.05\Delta v_\Lambda \left(1 - \frac{2\Delta v_\Lambda}{\Delta v_\Lambda + \sqrt{\Delta v_\Lambda^2 + 4\Delta v_D^2}} \right) \quad (\text{П.4})$$

Величина τ_2 также не является постоянной за фронтом ударной волны, а зависит от условий в газе – температуры и плотности электронов и ионов.

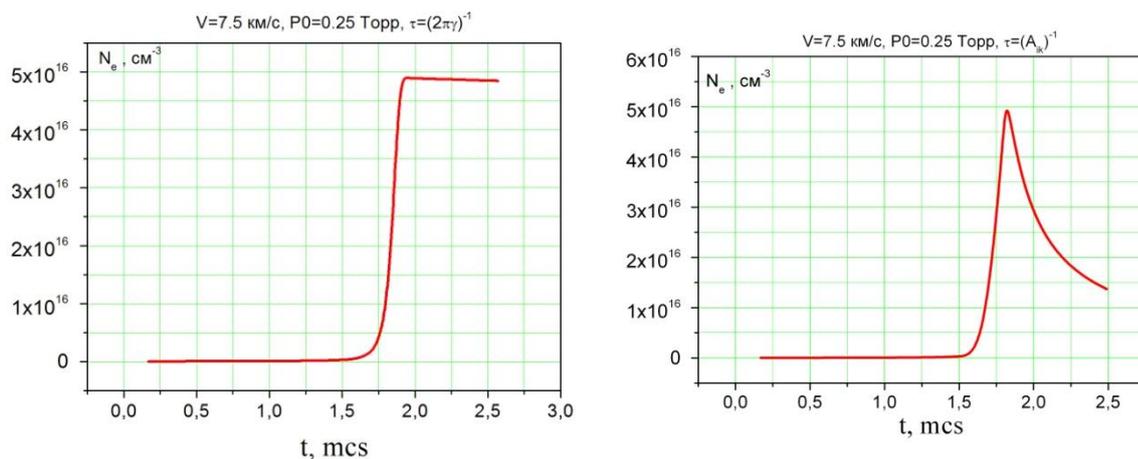
Вопрос о времени жизни может быть весьма важен в расчетах лучистых потоков при движении тел в атмосфере с большими скоростями. При малых временах жизни заселенность уровня быстро опустошается, что в конечном итоге приводит к уменьшению мощности излучения, например, при излучении основных атомарных линий компонент газа. Принимая во внимание большое уширение атомарных линий N и O при высоких температурах в ударных волнах, можно сделать вывод о малых временах жизни излучающих уровней по сравнению с временем жизни, определяемом коэффициентом Эйнштейна. Применяемая часто в расчетах радиационной газодинамики концепция убыли возбужденных состояний за счет спонтанного излучения со скоростью, определяемой коэффициентами Эйнштейна, по видимому, не всегда справедлива, особенно при большой концентрации электронов. Это может приводить к завышенным расчетным мощностям излучения.

На рисунках далее показано, как влияет величина времени жизни на заселенность атомов аргона на излучающем уровне 4p (линия 696.5 нм) и на другие параметры газа за фронтом ударной волны. В первом случае $\tau = (A_{ik})^{-1}$, где A_{ik} – коэффициент Эйнштейна для верхнего уровня линии 696.5 нм (рисунки справа). Во втором случае (рисунки слева) величина τ определяется с учетом всех возможных уширений по формулам (П.3) и (П.4).

Расчеты выполнены для режима $V = 7.5 \text{ км/с}$, $p_0 = 0.25 \text{ Торр}$.

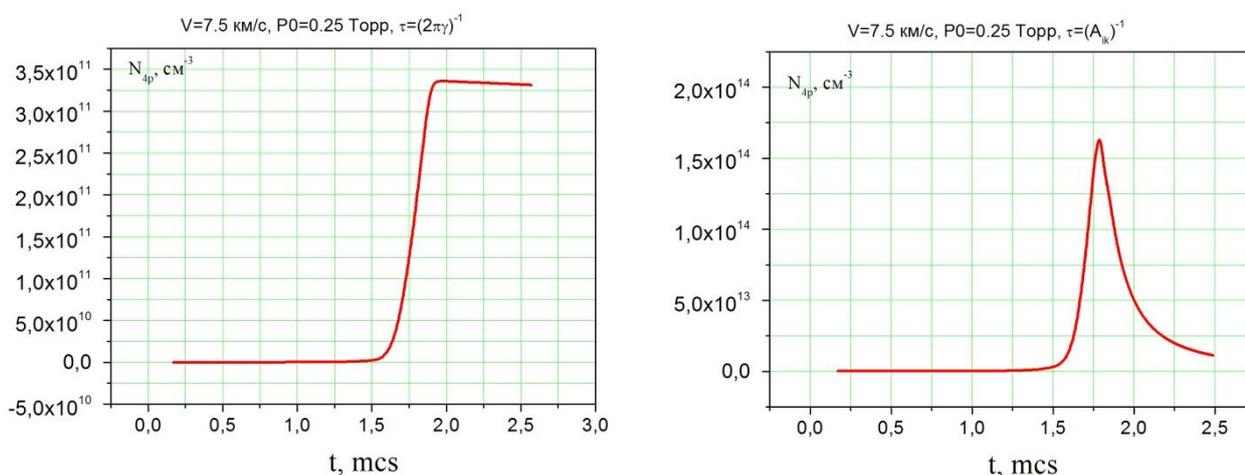


A)

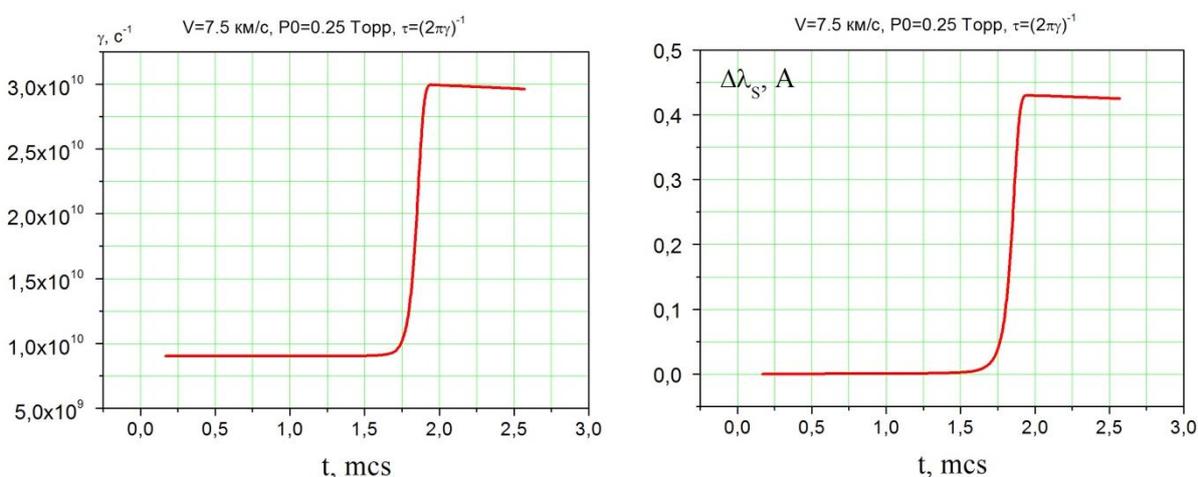


Б)

Рис. П2-1. Зависимости температуры и концентрации электронов от величины времени жизни возбужденного состояния



А)



Б)

Рис. П2-2. Влияние величины времени жизни на концентрацию возбужденного состояния (А), изменение ширины фойгтовского профиля и штарковского уширения для линии 696.5 нм от времени (Б)

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований проект №13-08-00705.

Литература

1. Быкова Н.Г., Герасимов И.Г., Забелинский И.Е., Ибрагимова Л.Б., Шаталов О.П. Исследование ударно-нагретого воздуха в спектральной области 120 ÷ 900 нм: панорамный спектр и эволюция излучения за фронтом ударной волны // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2014. Т.15, вып. 2. 7с. <http://chemphys.edu.ru/issues/2014-15-2/articles/114/>
2. Козлов П.В., Романенко Ю.В. Исследование временных характеристик излучения ударно-нагретого воздуха // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2014. Т.15, вып. 2. 8с. <http://chemphys.edu.ru/issues/2014-15-2/articles/221/>
3. Физико-химическая кинетика в газовой динамике. Справочник. Том. 2: Физико-химическая кинетика и термодинамика //Под ред. Г.Г.Черного и С.А. Лосева – М.: Научно-издательский центр механики. 2002. 368 с.
4. Tachibana K. Excitation of the 1s₅, 1s₄, 1s₃, and 1s₂ levels of argon by low-energy electrons.// *Physical Review A*. (1986). Vol. 34. No 2. Pp. 1007–1015.
5. Великович А.Л., Либерман М.А. Физика ударных волн в газах и плазме. М.: Наука. 1987. 295 с.
6. Breden D., Raja L. Simulation of nanosecond pulse plasmas in supersonic flows for combustion applications.// *AIAA Journal*. (2012). Vol. 50. No 3. Pp. 647–658.
7. Lennon M.A., Bell K.L., Gilbody H.B., Hughes J.C., Kingston A.E., Murray M.J., Smith F.J. Recommended Data on the Electron Impact Ionization of Atom and Ions[^] Fluorine to Nickel // *Journal of Physical and Chemical Reference Data* **17**, № 3, 1285-1363 (1988); doi:10.1063/1.555809.
8. J.L. Kappera M.G. Ionizing Shocks in Argon. Part 1: Collisional - Radiative Model and Steady-State Structure//*Journal of applied physics*. 2011. Vol.109. P. 113308.
9. Viček J. A collisional - radiative model applicable to argon discharges over a wide range of conditions. I. Formulation and basic data.// *J. Phys. D*: (1989). Vol. 22. Pp. 623–631.
10. Vacri J., Gomes A.M. Influence of atom-atom collisions on thermal equilibrium in argon arc discharges at atmospheric pressure.// *J. Phys. D: Appl. Phys.*(1978). Vol.11. Pp. 2185–2197.
11. Deconinck T., Raja L.L. Modeling of mode transition behavior in argon micro hollow cathode discharges.// *Plasma processes and polymers*. (2009). Vol. 6. Pp. 335–346.
12. Lay B., Moss R.S., Raut S., Kushner M.J. Breakdown processes in metal halid lamps.// *Plasma sources science and technology*. (2003). Vol. 12. Pp. 8–12.
13. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание: В 4-х т. //Л.В. Гурвич, И.В. Вейц, В.А. Медведев и др. — 3-е изд., перераб. и расширен. — Т. I. Кн. 1. — М.: Наука, 1978. — 496 с.
14. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание: В 4-х т. //Л.В. Гурвич, И.В. Вейц, В.А. Медведев и др. — 3-е изд., перераб. и расширен. — Т. I. Кн. 2. — М.: Наука, 1978. — 328 с.
15. *NIST Atomic Spectra Database* (ver. 5.1), [Online]. Available: <http://physics.nist.gov/asd> [2014, February 28]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD
16. Cambier J.L, Kapper M.G. Ionizing Shocks in Argon. Part 1: Collisional-Radiative Model and Steady-State Structure (Preprint) // *Journal of Applied Physics* 07/2011; 109(11):113308 - 113308-14. DOI: 10.1063/1.3585688
17. Биберман Л.М., Воробьев В.С., Якубов И.Т. Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы. М.: Наука, 1982.
18. Petschek H., Byron S. Approach to Equilibrium Ionization behind Strong Shock Waves in Argon // *Ann. Phys.*, 1, 270-315 (1957).

19. Glass I.I., Liu W.S. Effects of hydrogen impurities on shock structure and stability in ionizing monatomic gases. Part 1. Argon // *J. Fluid Mech.* (1978), Vol. 84. Pt 1. Pp. 55–77.
20. Meiners D., Weiss C.O. // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* (1976) 16.
21. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия. Изд. 2-е – М.: Эдиториал УРСС, 2001. – 896 С.
22. Martin I. Hoffert, Hwachii Lien Quasi One Dimensional, Non equilibrium Gas Dynamics of Partially Ionized Two Temperature Argon // *Physics of Fluids* (1958–1988) 10, 1769 (1967); doi: 10.1063/1.1762356
23. Кузнецова Л.А., Кузьменко Н.Е., Кузяков Ю.Я., Пластинин Ю.А. Вероятности оптических переходов двухатомных молекул.- М., Наука, 1980, 320с.
24. Козлов П.В. Экспериментальное исследование радиационных свойств воздуха за фронтом ударной волны при скоростях до 10 км/с // Всероссийская школа-семинар «Аэрофизика и физическая механика классических и квантовых систем»: Сборник научных трудов. – М.: ИП-Мех РАН. 2015.
25. Glass I.I., Liu W.S., Tang F.C. Effects of hydrogen impurities on shock structure and stability in ionizing monatomic gases: 2. Krypton // *Can. J. Phys.* 1977. V. 55. Pp. 1269–1279.
26. Яковлев В.И. Радиационная релаксация плазмы аргона за ударной волной // *Письма в ЖТФ.* 2006. Т. 32, вып. 11. С. 89–94.
27. Кацнельсон С. С., Ковальская Г.А. Теплофизические и оптические свойства аргоновой плазмы. – Новосибирск. Изд-во «Наука», СО, 1985, 147 с.
28. Матвеев В.С. Приближенные представления коэффициентов поглощения и эквивалентных ширин линий с фойгтовским контуром. // *ЖПС*, 1971, т.16, № 2, С. 228–233.