

Quasi-Steady-State Algebraic eRC Model for Predicting the Emissivity of Electron-Vibrational Bands of Diatomic Molecules

Sergey T. Surzhikov

*Ishlinskiy Institute for Problems in Mechanics Russian Academy of Sciences (IPMech RAS),
Moscow, 119526, Russia*

surg@ipmnet.ru

Abstract

The quasi-steady-state (QSS) electron-radiation-collisional (eRC) model formulated for the electron states of diatomic molecules N_2 , N_2^+ , and NO is discussed. The kinetic equations of the QSS eRC model are considered in detail. The problems of providing the eRC-model with the rate constants of population and deactivation of separately considered electron states during collisions of diatomic molecules with electrons and heavy particles, as well as the kinetic constants for the reactions of spontaneous photon emission and associative recombination are discussed. A simplified method for solving the system of kinetic equations is proposed. The results of calculating the populations of individual electron states of diatomic molecules at characteristic parameters of the compressed layer near the Sturdust spacecraft are presented in comparison with the populations calculated using the Boltzmann functions with electron temperature.

Key words: electron-radiative-collision model, emissivity of electron-vibrational bands of diatomic molecules.

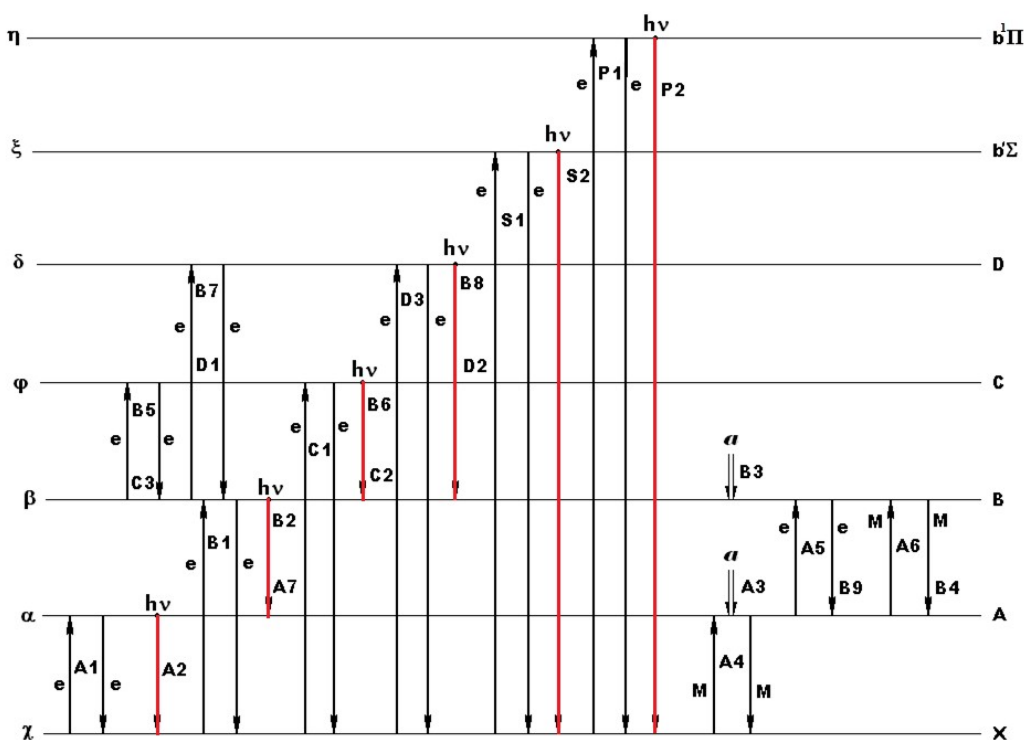


Diagram D1: Schematic representation of a simplified kinetic scheme of the populations of the quantum levels of N_2

УДК 533.92:533.6.01

Квазистационарная алгебраическая eRC-модель для предсказания излучательной способности электронно-колебательных полос двухатомных молекул

С. Т. Суржиков

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

surg@ipmnet.ru

Аннотация

Обсуждается квазистационарная электронно-радиационно-столкновительная (eRC) модель, которая сформулирована для электронных состояний двухатомных молекул N_2 , N_2^+ и NO. Подробно рассмотрены кинетические уравнения eRC-модели. Обсуждаются проблемы обеспечения eRC-модели константами скоростей заселения и дезактивации отдельно рассматриваемых электронных состояний при столкновении двухатомных молекул с электронами и тяжелыми частицами, а также кинетические константы для реакций спонтанного испускания фотонов и ассоциативной рекомбинации. Предложен упрощенный метод решения системы кинетических уравнений. Представлены результаты расчетов заселенностей отдельных электронных состояний двухатомных молекул при характерных параметрах сжатого слоя вблизи спускаемого космического аппарата Sturdust в сравнении с заселенностями, рассчитанными по больцмановским функциям с электронной температурой.

Ключевые слова: электронно-радиационно-столкновительная модель, излучательные способности электронно-колебательных полос двухатомных молекул.

1. Введение

При изучении процессов теплообмена спускаемых космических аппаратов в атмосферах планет [1–6] и в лабораторных экспериментах по излучению сильных ударных волн [7–12] установлено, что излучательная способность атмосферных газов в диапазоне температур $\sim 10^3 \div 10^4$ К во многом обусловлена электронно-колебательными и колебательными полосами молекулярных компонент.

Разработанные спектральные модели и базы данных спектральных оптических свойств [13–15] позволяют с удовлетворительной точностью интерпретировать имеющиеся экспериментальные данные [8, 16–32]. Однако, важной составной частью процедуры расчета излучательной способности высокотемпературных газов является определение концентраций частиц, находящихся в возбужденных квантовых состояниях (часто используется термин «заселенностей» квантовых состояний).

В случае установления равновесия по поступательным, вращательным, колебательным и электронным состояниям молекул задача определения заселенностей возбужденных квантовых состояний решается достаточно просто с использованием функции распределения Больцмана с единой термодинамически равновесной температурой [7].

Расчетная интерпретация неравновесного излучения в ударно-волновых экспериментах позволила предложить и, впоследствии, широко использовать некоторое усложнение больцмановской модели, состоящее в использовании температуры поступательных и колебатель-

ных степеней свободы [7, 8, 11, 19]. В этих моделях предполагается, как правило, что вращательные степени свободы распределены с поступательной температурой.

Не до конца исследованным остается вопрос о целесообразности использования электронной температуры для определения заселенностей электронно-возбужденных состояний [7].

Для решения задачи расчета заселенностей электронно-возбужденных состояний найдла распространение радиационно-столкновительная модель (Radiative-Collisional – RC) [33–35] и ее разновидность – электронно-радиационно-столкновительная модель (eRC) [35]. В случае eRC-модели электронная температура находится из решения уравнения сохранения электронной температуры T_e , в правую часть которого входит множество источников функций, определяющих процесс нагрева или остывания T_e за счет многообразия элементарных кинетических процессов. Поскольку решение уравнения сохранения энергии электронного газа является некоторым дополнением к решению системы кинетических уравнений, далее для данного класса моделей будет также использоваться обозначение (e)RC для того, чтобы подчеркнуть, что применяемые численные алгоритмы решения системы кинетических уравнений относятся как к RC-, так и к (e)RC-моделям.

В случае использования (e)RC-моделей для определения заселенностей отдельных электронно-возбужденных состояний формулируются кинетические уравнения, содержащие вероятности квантовых переходов (константы скоростей квантовых процессов). Преимуществами таких моделей является то, что для отдельных квантовых переходов удается использовать результаты квантово-химических расчетов, что повышает научную обоснованность задания скоростей реакций соответствующих элементарных процессов.

Главным недостатком (e)RC-моделей является резкое увеличение числа кинетических уравнений, при индивидуальном учете квантовых уровней. Еще одним недостатком является то, что использование квантово-химических моделей не всегда является гарантом высокой точности расчетов, поскольку при проведении таких расчетов не всегда достаточно хорошо известны спектроскопические константы электронно-возбужденных состояний. Тем не менее, следует признать, что (e)RC- модели имеют хорошие перспективы в развитии методов решения задач определения излучательных способностей высокотемпературных газов.

В данной работе предлагается упрощенный метод решения кинетических уравнений (e)RC-модели, состоящий в использовании упрощения о стационарном (установившемся) процессе энергообмена между выделенными квантовыми состояниями. В ряде случаев такое приближение позволяет заметно повысить эффективность численной процедуры.

2. Формулировка QSS (e)RC модели для расчета заселенности электронно-возбужденных состояний двухатомных молекул N_2 , N_2^+ and NO

Исследованная eRC-модель предназначена для описания спектральной излучательной способности, обусловленной неравновесной заселенностью электронных состояний двухатомных молекул. Для расчетов были выбраны электронные полосы двухатомных молекул N_2 , N_2^+ и NO, которые дают наибольший вклад в излучательную способность молекулярного спектра частично ионизованного воздуха, приведенные в приложении в Таблице П.1. В этой таблице даны спектроскопические обозначения комбинирующих электронных состояний, имя электронно-колебательных полос, а также спектральные диапазоны, в которых наблюдаются полосы испускания оптического излучения, регистрируемого в экспериментах. Все электронные переходы, кроме первого (для полосы Вегарда – Каплана (VK) не выполняется правило отбора $\Delta S = 0$), относятся к классу дипольных.

В основу построения кинетической схемы заселения и обеднения электронно-возбужденных состояний двухатомных молекул положим графическое представление электронных уровней указанных молекул (см., для примера, потенциальные кривые молекул N_2 и N_2^+ на

рис. 1) и кинетическое уравнение, предложенное В. Паули [53] и получившее в литературе название «управляющее уравнение» (“master equation”)

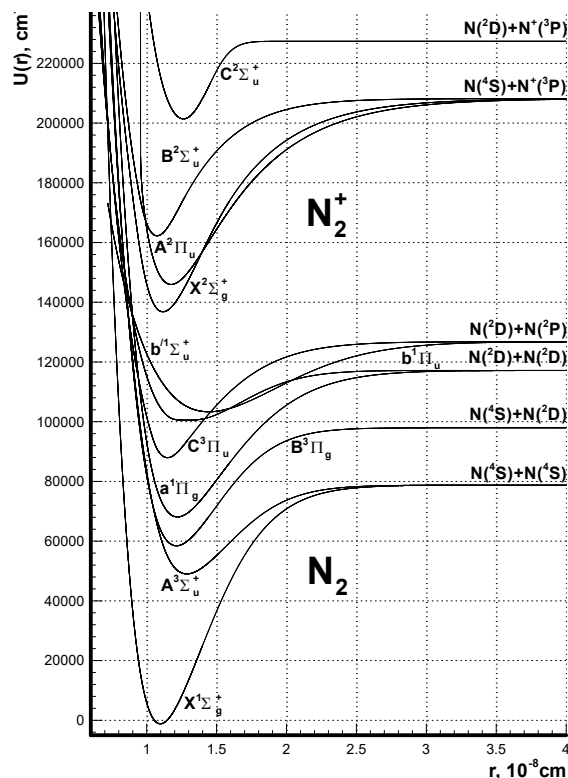


Рис. 1. Потенциальные кривые электронных состояний молекул N_2 и N_2^+ [36]

$$\begin{aligned}
 \frac{d[A_n]}{dt} = & \sum_{j=1}^{n-1} k_{ex}^{(e)}(A, j; E_e | A, n) [A_j] [e] + \sum_{m=n+1}^{m_{\max}} k_{de}^{(e)}(A, m; E_e | A, n) [A_m] [e] - \\
 & - \sum_{j=1}^{n-1} k_{de}^{(e)}(A, n; E_e | A, j) [A_n] [e] - \sum_{m=n+1}^{m_{\max}} k_{ex}^{(e)}(A, n; E_n | A, m) [A_n] [e] - \\
 & - k_i^{(e)} [A_n] [e] + k_r^{(e)} [A^+(1)] [e]^2 + \sum_{m=n+1}^{m_{\max}} \tilde{A}_{m,n}(A, m | A, n; h\nu) [A_m] + \\
 & + \sum_{j=1}^{n-1} \tilde{B}_{j,n} U_\nu (1 - \chi_{n,j}) - \sum_{j=1}^{n-1} \tilde{A}_{n,j}(A, n | A, j; h\nu) [A_n] - \sum_{m=n+1}^{m_{\max}} \tilde{B}_{n,m} U_\nu (1 - \chi_{n,m}) + \\
 & + \beta_{r,n} [A^+(1)] [e] - \sigma_{i,n} [A_n] U_\nu (1 - \chi_{i,n}) - k_i^{(M)}(A, n; M | A^+, 1; e; M) [A_n] [M] + \\
 & + k_r^{(M)}(A^+, 1; e; M | A, n; M) [A^+(1)] [M] [e] + \sum_{j=1}^{n-1} k_{ex}^{(M)}(A, j; M | A, n; M) [A_j] [M] + \\
 & + \sum_{m=n+1}^{m_{\max}} k_{de}^{(M)}(A, m; M | A, n; M) [A_m] [M] - \sum_{j=1}^{n-1} k_{de}^{(M)}(A, n; M | A, j; M) [A_n] [M] - \\
 & - \sum_{m=n+1}^{m_{\max}} k_{ex}^{(M)}(A, n; M | A, m; M) [A_n] [M]
 \end{aligned} \tag{1}$$

При записи этого уравнения использовались следующие обозначения:

$k_i^{(e)}, k_r^{(e)}$ – коэффициенты скоростей ионизации и рекомбинации при столкновении с электронами (e);

$k_i^{(M)}, k_r^{(M)}$ – коэффициенты скоростей ионизации и рекомбинации при столкновении с тяжелыми частицами (M);
 $k_{ex}^{(e)}, k_{de}^{(e)}, k_{ex}^{(M)}, k_{de}^{(M)}$ – коэффициенты скоростей возбуждения (*ex*) и девозбуждения (*de*) при столкновении с электронами (e) и тяжелыми частицами (M);
 $\sigma_{i,n}, \beta_{r,n}$ – коэффициенты фотоионизации и фоторекомбинации на уровень *n*;
 $\tilde{A}_{n,j}$ – коэффициент Эйнштейна спонтанного испускания излучения при переходе с уровня *n* на уровень *j* ($j < n$);
 $\tilde{B}_{j,n}$ – коэффициент Эйнштейна поглощения излучения с переходом с уровня *j* на уровень *n* ($j < n$);
 U_v – спектральная объемная плотность теплового излучения;
 $[A_n]$ – концентрация частиц A в квантовом состоянии *n*;
 $[A^+(1)]$ – концентрация ионов в основном состоянии (если A_n – ион кратности *z*, то $A^+(1)$ – ион кратности ($z + 1$); предполагается, что ион каждой последующей кратности образуется в основном состоянии).

В списке аргументов констант скоростей элементарных процессов дана информация о характеристиках того или иного квантового перехода. Например, $k_{ex}^{(e)}(A, j; E_e | A, n)$ означает, что квантовый переход в состояние *n* частицы A обусловлен исходным состоянием *j* частицы A, взаимодействующим со свободным электроном энергией E_e . Данное обозначение имеет непосредственное отношение к системе обозначений, принятых в квантовой механике для обозначения матричных элементов квантовых переходов.

Суммирование в кинетическом уравнении (1) выполняется вплоть до наибольшего учитываемого квантового состояния n_{\max} . Учтенные электронно-возбужденные состояния приведены в таблицах П.2 и П.3. Заметим, что с ростом энергии электронно-возбужденного состояния возрастает неопределенность в знании спектроскопических постоянных, характеризующих эти состояния.

Из системы уравнений (1) следует, что для определения заселенности квантового состояния *n* в общем случае необходимо знать заселенности всех учитываемых квантовых состояний и вероятности (константы скоростей) квантовых переходов между этими состояниями. Понятно, что решению системы кинетических уравнений (1) препятствует исключительная трудоемкость ее интегрирования для подробной кинетической схемы. При этом, следует иметь в виду часто не достаточный уровень знания структуры квантовых уровней молекул и констант скоростей элементарных процессов. В частности, спектроскопические постоянные высоковозбужденных состояний, которые, как в случае молекулы N₂, имеют важное значение для определения интенсивности полос Берджесса – Хопфилда 1 и 2 (состояния $b^1\Pi_u$ и $b'^1\Sigma_u^+$) [37]. Заметим, что в таблице П.3 и на рис. 2 состояния N₂($D^3\Sigma_u^+$), N₂($b'^1\Sigma_u^+$) и N₂($b'^1\Pi_g$) расположены не в порядке возрастания энергии, что для графического представления кинетической схемы не имеет значения.

Практически все реализуемые в настоящее время модели являются гибридными, в которых часть наиболее важных электронных состояний учитываются индивидуально, а основная масса квантовых состояний описывается в рамках модели максвелл-больцмановского распределения.

В данной работе используется еще одно упрощение системы уравнений (1), состоящее в допущении о квазистационарном характере формирования заселенностей, что позволяет приравнять нулю правые части всех уравнений. Ограничив число индивидуально учитываемых уровней и приравняв нулю правые части всех уравнений, получим систему определяющих уравнений для отдельных электронно-возбужденных состояний молекул.

Поясним обозначения, использованные на схематических представлениях упрощенных кинетических схем (рис. 2–4). При обозначении квантовых переходов также использованы следующие обозначения: e – возбуждение и дезактивация квантового состояния электронным

ударом; M – возбуждение и дезактивация квантового состояния ударом тяжелой частицы; a – ассоциативное возбуждение; $h\nu$ – спонтанное испускание фотона.

Остальные обозначения на приведенных диаграммах фиксируют конкретные квантовые переходы для каждого квантового уровня. Для простоты анализа кинетической схемы используются два типа таблиц. В таблице П.2 приведены обозначения электронных уровней (левая колонка на рис. 2) и концентраций (правая колонка), которые использовались при формулировке кинетической схемы. В таблицах П.4а–П.6а дан полный перечень элементарных процессов, учитываемых в кинетической схеме формирования заселенностей электронно-возбужденных состояний. В таблицах П.4б–П.6б элементарные процессы сгруппированы по принадлежности фиксированному электронно-возбужденному уровню. В этих же таблицах приведены некоторые другие обозначения, которые используются при записи системы кинетических уравнений.

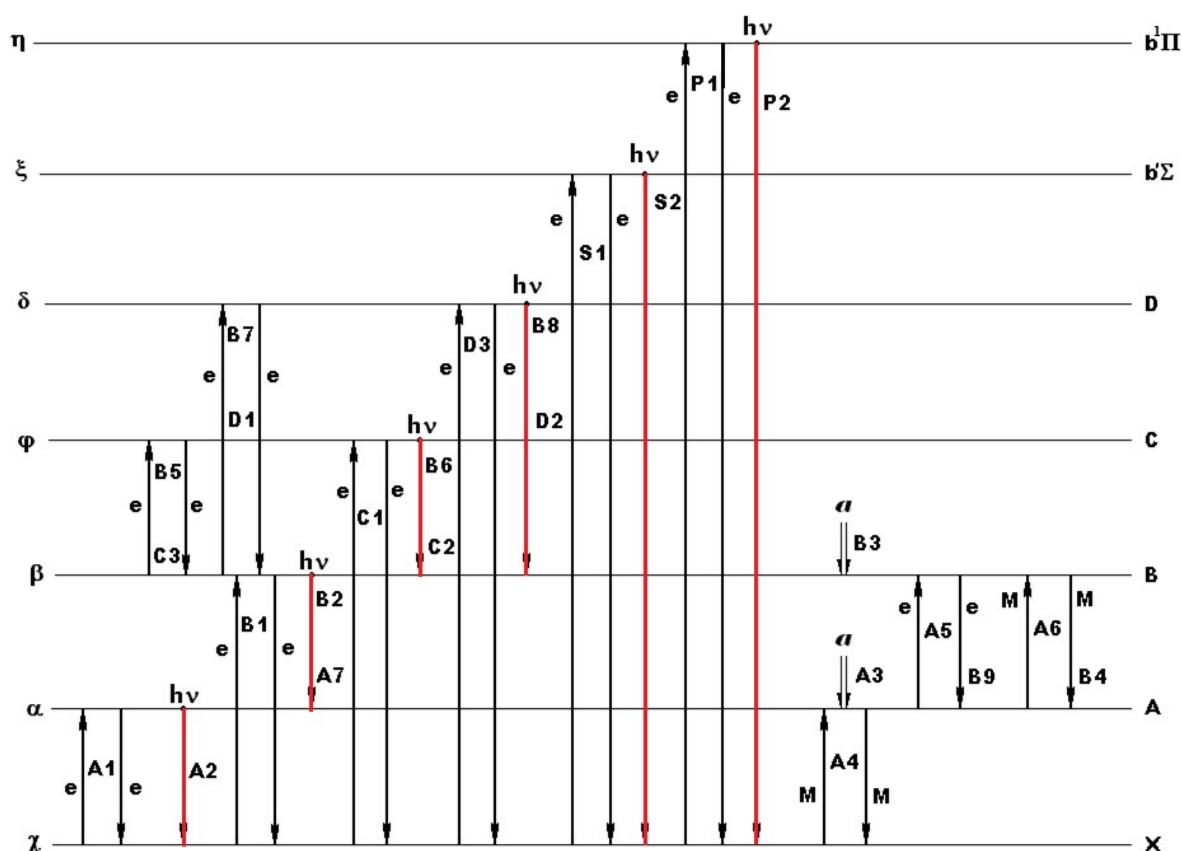


Рис. 2. Диаграмма D1: Схематическое представление упрощенной кинетической схемы заселенностей квантовых уровней N_2

В качестве примера, рассмотрим подробнее связь обозначений, представленных в таблицах П.4а и П.4б с диаграммой квантовых переходов, показанной на рис. 2 (диаграмма D1). Заселенность первого электронно-возбужденного квантового состояния молекулы $N_2(A)$ формируется посредством семи квантовых переходов, перечисленных в таблице П.4б (обозначены A1, A2, ..., A7 в правой колонке таблицы П.4б).

Среди этих переходов два процесса E1 и E9 обусловлены столкновениями с электронами. Кинетическая схема этих процессов и обозначения констант скоростей даны в табл. П.4а в разделе «Реакция возбуждения электронным ударом».

В формировании заселенности состояния A принимают участие два процесса M1 и M2, связанные со столкновениями с тяжелыми частицами. Кинетическая схема этих процессов и обозначения констант скоростей даны в табл. П.4а в разделе «Реакция возбуждения тяжелыми частицами».

Возбужденное состояние А также формируется при испускании излучения (процесс P1) и заселения в результате испускания излучения из состояния В (процесс P2). Кинетические схемы этих двух процессов даны в табл.П.4а в разделе «Радиационная дезактивация». Аналогично выполняется анализ элементарных процессов для других электронно-возбужденных состояний.

Схематическое представление упрощенной кинетической схемы заселенности квантовых уровней N₂ и приближение квазистационарности (так называемое QSS-приближение) позволяет сформулировать управляющие уравнения для заселенностей квантовых уровней молекул N₂

$$\alpha) \quad \underbrace{\chi\psi k_{f,\chi\alpha}^e - \alpha\psi k_{r,\chi\alpha}^e}_{A1} - \underbrace{\alpha k_{v,\alpha\chi}}_{A2} + \underbrace{[N][N]Mk_{f,\alpha}^a - \alpha Mk_{r,\alpha}^a}_{A3} + \underbrace{\chi Mk_{f,\chi\alpha}^M - \alpha Mk_{r,\chi\alpha}^M}_{A4} - \underbrace{\alpha\psi k_{f,\alpha\beta}^e + \beta\psi k_{r,\alpha\beta}^e}_{A5} - \underbrace{\alpha Mk_{f,\alpha\beta}^M + \beta Mk_{r,\alpha\beta}^M}_{A6} + \underbrace{\beta k_{v,\beta\alpha}}_{A7} = 0; \quad (2)$$

$$\beta) \quad \underbrace{\chi\psi k_{f,\chi\beta}^e - \beta\psi k_{r,\chi\beta}^e}_{B1} - \underbrace{\beta k_{v,\beta\alpha}}_{B2} + \underbrace{[N][N]Mk_{f,\beta}^a - \beta Mk_{r,\beta}^a}_{B3} + \underbrace{\alpha Mk_{f,\alpha\beta}^M - \beta Mk_{r,\alpha\beta}^M}_{B4} - \underbrace{\beta\psi k_{f,\beta\phi}^e + \phi\psi k_{r,\beta\phi}^e}_{B5} + \underbrace{\phi k_{v,\phi\beta}}_{B6} - \underbrace{\beta\psi k_{f,\beta\delta}^e + \delta\psi k_{r,\beta\delta}^e}_{B7} + \underbrace{\delta k_{v,\delta\beta}}_{B8} + \underbrace{\alpha\psi k_{f,\alpha\beta}^e - \beta\psi k_{r,\alpha\beta}^e}_{B9} = 0; \quad (3)$$

$$\phi) \quad \underbrace{\chi\psi k_{f,\chi\phi}^e - \phi\psi k_{r,\chi\phi}^e}_{C1} - \underbrace{\phi k_{v,\phi\beta}}_{C2} + \underbrace{\beta\psi k_{f,\beta\phi}^e - \phi\psi k_{r,\beta\phi}^e}_{C3} = 0; \quad (4)$$

$$\delta) \quad \underbrace{\beta\psi k_{f,\beta\delta}^e - \delta\psi k_{r,\beta\delta}^e}_{D1} - \underbrace{\delta k_{v,\delta\beta}}_{D2} + \underbrace{\chi\psi k_{f,\chi\delta}^e - \delta\psi k_{r,\chi\delta}^e}_{D3} = 0; \quad (5)$$

$$\xi) \quad \underbrace{\chi\psi k_{f,\chi\xi}^e - \xi\psi k_{r,\chi\xi}^e}_{S1} - \underbrace{\xi k_{v,\xi\chi}}_{S2} = 0; \quad (6)$$

$$\eta) \quad \underbrace{\chi\psi k_{f,\chi\eta}^e - \eta\psi k_{r,\chi\eta}^e}_{P1} - \underbrace{\eta k_{v,\eta\chi}}_{P2} = 0 \quad (7)$$

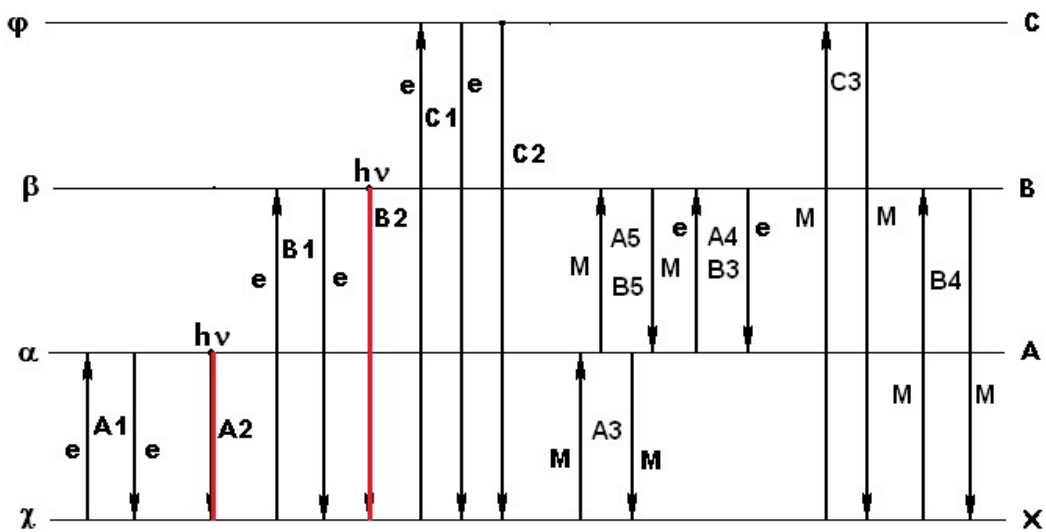


Рис. 3. Диаграмма D2: Схематическое представление упрощенной кинетической схемы заселенностей квантовых уровней N₂

По аналогии формулируются управляющие уравнения для заселенностей квантовых уровней молекул N_2^+ :

$$\alpha) \quad \underbrace{\chi\psi k_{f,\chi\alpha}^e}_{FE1} - \underbrace{\alpha\psi k_{r,\chi\alpha}^e}_{RE1} + \underbrace{\chi Mk_{f,\chi\alpha}^M}_{FM1} - \underbrace{\alpha Mk_{r,\chi\alpha}^M}_{RM1} - \underbrace{\alpha Mk_{f,\alpha\beta}^M}_{FM4} + \underbrace{\beta Mk_{r,\alpha\beta}^M}_{RM4} - \underbrace{\alpha\psi k_{f,\alpha\beta}^e}_{FE4} + \underbrace{\beta\psi k_{r,\alpha\beta}^e}_{FE4} - \underbrace{\alpha k_{v,\alpha\chi}}_{P1} = 0; \quad (8)$$

$$\beta) \quad \underbrace{\chi\psi k_{f,\chi\beta}^e}_{FE2} - \underbrace{\beta\psi k_{r,\chi\beta}^e}_{RE2} + \underbrace{\chi Mk_{f,\chi\beta}^M}_{FM2} - \underbrace{\beta Mk_{r,\chi\beta}^M}_{RM2} + \underbrace{\alpha Mk_{f,\alpha\beta}^M}_{FM4} - \underbrace{\beta Mk_{r,\alpha\beta}^M}_{RM4} + \underbrace{\alpha\psi k_{f,\alpha\beta}^e}_{FE4} - \underbrace{\beta\psi k_{r,\alpha\beta}^e}_{RE4} - \underbrace{\beta k_{v,\beta\chi}}_{P2} = 0; \quad (9)$$

$$\varphi) \quad \underbrace{\chi\psi k_{f,\chi\varphi}^e}_{FE3} - \underbrace{\varphi\psi k_{r,\chi\varphi}^e}_{RE3} + \underbrace{\chi Mk_{f,\chi\varphi}^M}_{FM3} - \underbrace{\varphi Mk_{r,\chi\varphi}^M}_{RM3} - \underbrace{\varphi k_{v,\varphi\chi}}_{P3} = 0 \quad (10)$$

По аналогии формулируются управляющие уравнения для заселенностей квантовых уровней молекул NO:

$$\alpha) \quad \underbrace{\chi\psi k_{f,\chi\alpha}^e}_{E1} - \underbrace{\alpha\psi k_{r,\chi\alpha}^e}_{E1} - \underbrace{\alpha\psi k_{f,\alpha\beta}^e}_{E4} + \underbrace{\beta\psi k_{r,\alpha\beta}^e}_{E4} - \underbrace{\alpha\psi k_{f,\alpha\varphi}^e}_{E6} + \underbrace{\varphi\psi k_{r,\alpha\varphi}^e}_{E6} + \underbrace{\chi Mk_{f,\chi\alpha}^M}_{M1} - \underbrace{\alpha Mk_{r,\chi\alpha}^M}_{M1} - \underbrace{\alpha Mk_{f,\alpha\varphi}^M}_{M4} + \underbrace{\varphi Mk_{r,\alpha\varphi}^M}_{M4} - \underbrace{\alpha k_{v,\alpha\chi}}_{P1} + \underbrace{[N][O]k_{f,\alpha}^a}_{A1} - \underbrace{\alpha k_{r,\alpha}^a}_{A1} = 0; \quad (11)$$

$$\beta) \quad \underbrace{\chi\psi k_{f,\chi\beta}^e}_{E2} - \underbrace{\beta\psi k_{r,\chi\beta}^e}_{E2} + \underbrace{\alpha\psi k_{f,\alpha\beta}^e}_{E4} - \underbrace{\beta\psi k_{r,\alpha\beta}^e}_{E4} - \underbrace{\beta\psi k_{f,\beta\varphi}^e}_{E5} + \underbrace{\varphi\psi k_{r,\beta\varphi}^e}_{E5} + \underbrace{\chi Mk_{f,\chi\beta}^M}_{M2} - \underbrace{\beta Mk_{r,\chi\beta}^M}_{M2} - \underbrace{\beta k_{v,\beta\chi}}_{P2} + \underbrace{[N][O]k_{f,\beta}^a}_{A2} - \underbrace{\beta Mk_{r,\beta}^a}_{A2} = 0; \quad (12)$$

$$\varphi) \quad \underbrace{\chi\psi k_{f,\chi\varphi}^e}_{E3} - \underbrace{\varphi\psi k_{r,\chi\varphi}^e}_{E3} + \underbrace{\beta\psi k_{f,\beta\varphi}^e}_{E5} - \underbrace{\varphi\psi k_{r,\beta\varphi}^e}_{E5} + \underbrace{\alpha\psi k_{f,\alpha\varphi}^e}_{E6} - \underbrace{\varphi\psi k_{r,\alpha\varphi}^e}_{E6} + \underbrace{\chi Mk_{f,\chi\varphi}^M}_{M3} - \underbrace{\varphi Mk_{r,\chi\varphi}^M}_{M3} - \underbrace{\varphi k_{v,\varphi\chi}}_{P3} = 0 \quad (13)$$

Полученные системы уравнений допускают решение посредством алгебраических соотношений.

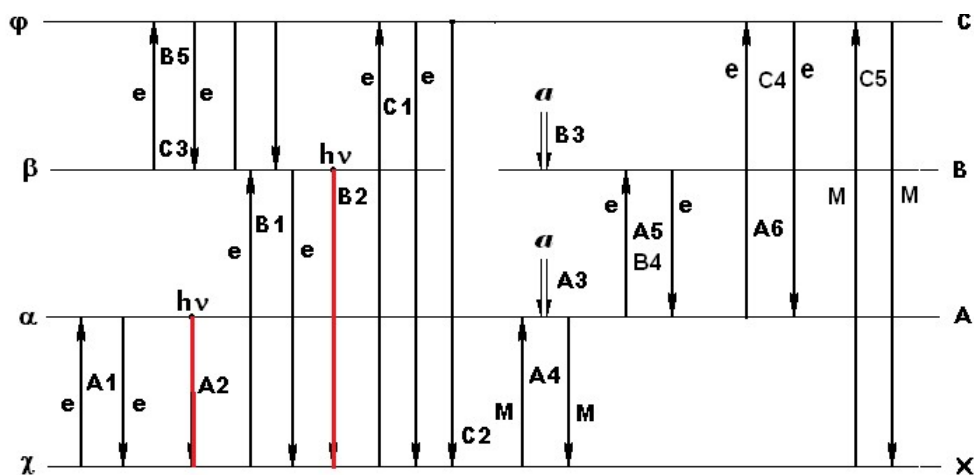


Рис. 4. Схематическое представление упрощенной кинетической схемы заселенностей квантовых уровней NO

3. Способ решения системы кинетических уравнений (2)–(13)

3.1. Решение кинетических уравнений для молекулы N₂

Обозначив заселенность электронного состояния $[N_2(B)] = \beta$, получим расчетные соотношения

$$\beta = \frac{R_\beta + b_\alpha (\psi k_{f,\alpha\beta}^e + M k_{f,\alpha\beta}^M) + b_\varphi (\psi k_{r,\beta\varphi}^e + k_{v,\varphi\beta}) + b_\delta (\psi k_{r,\beta\delta}^e + k_{v,\delta\beta})}{1 - a_\alpha (\psi k_{f,\alpha\beta}^e + M k_{f,\alpha\beta}^M) - a_\varphi (\psi k_{r,\beta\varphi}^e + k_{v,\varphi\beta}) - a_\delta (\psi k_{r,\beta\delta}^e + k_{v,\delta\beta})},$$

$$a_\delta = \frac{\psi k_{f,\beta\delta}^e}{Z_\delta}, \quad b_\delta = \frac{\chi \psi k_{f,\chi\delta}^e}{Z_\delta}, \quad a_\alpha = \frac{\psi k_{f,\alpha\beta}^e}{Z_\alpha}, \quad b_\alpha = \frac{\chi \psi k_{f,\chi\alpha}^e}{Z_\alpha}, \quad a_\varphi = \frac{\psi k_{r,\beta\varphi}^e}{Z_\varphi}, \quad b_\varphi = \frac{\chi \psi k_{f,\chi\varphi}^e}{Z_\varphi},$$

$$a_\alpha = \frac{\psi k_{r,\alpha\beta}^e + M k_{r,\alpha\beta}^M + k_{v,\beta\alpha}}{Z_\alpha}, \quad b_\alpha = \frac{R_\alpha}{Z_\alpha},$$

$$Z_\alpha = \psi (k_{r,\chi\alpha}^e + k_{f,\alpha\beta}^e) + M (k_{r,\chi\alpha}^M + k_{f,\alpha\beta}^M + k_{r,\alpha}^a) + k_{v,\alpha\chi}, \quad R_\alpha = \chi \psi k_{f,\chi\alpha}^e + M ([N]^2 k_{f,\alpha}^a + \chi k_{f,\chi\alpha}^M),$$

$$Z_\varphi = \psi (k_{r,\chi\varphi}^e + k_{r,\beta\varphi}^e) + k_{v,\varphi\beta}, \quad Z_\delta = \psi (k_{r,\chi\delta}^e + k_{r,\beta\delta}^e) + k_{v,\delta\beta} \quad (14)$$

Заселенности остальных состояний определяются по формулам

$$\alpha = \beta a_\alpha + b_\alpha, \quad \varphi = \beta a_\varphi + b_\varphi, \quad \delta = \beta a_\delta + b_\delta, \quad \eta = \frac{\chi \psi k_{f,\chi\eta}^e}{\psi k_{r,\chi\eta}^e + k_{v,\eta\chi}}, \quad \xi = \frac{\chi \psi k_{f,\chi\xi}^e}{\psi k_{r,\chi\xi}^e + k_{v,\xi\chi}}, \quad (15)$$

где e и M обозначают мольно-объемные концентрации электронов и тяжелых частиц.

3.2. Решение кинетических уравнений для молекулы N₂⁺

Из (10) сразу определяются заселенности

$$\varphi = \frac{\chi \psi k_{f,\chi\varphi}^e + \chi M k_{f,\chi\varphi}^M}{Z_\varphi}, \quad \text{где } Z_\varphi = \psi k_{r,\chi\varphi}^e + M k_{r,\chi\varphi}^M + k_{v,\varphi\chi} \quad (16)$$

Для определения заселенностей двух других уровней используется система уравнений

$$\alpha \cdot Z_\alpha = \beta \cdot R_\beta + (\chi \psi k_{f,\chi\alpha}^e + \chi M k_{f,\chi\alpha}^M),$$

$$\beta \cdot Z_\beta = \alpha \cdot R_\alpha + (\chi \psi k_{f,\chi\beta}^e + \chi M k_{f,\chi\beta}^M), \quad (17)$$

где: $Z_\alpha = \psi k_{r,\chi\alpha}^e + k_{r,\chi\alpha}^M + M k_{f,\alpha\beta}^M + \psi k_{f,\alpha\beta}^e + k_{v,\alpha\chi}$,

$R_\beta = M k_{r,\alpha\beta}^M + \psi k_{r,\alpha\beta}^e$, $Z_\beta = \psi k_{r,\chi\beta}^e + M k_{r,\chi\beta}^M + M k_{r,\alpha\beta}^M + \psi k_{r,\alpha\beta}^e + k_{v,\beta\chi}$,

$R_\alpha = M k_{f,\alpha\beta}^M + \psi k_{f,\alpha\beta}^e$.

Решение этой системы имеет вид:

$$\beta = \frac{Q_\alpha R_\alpha + Q_\beta Z_\alpha}{Z_\beta Z_\alpha - R_\beta R_\alpha}, \quad (18)$$

$$\alpha = \beta \frac{R_\beta}{Z_\alpha} + \frac{Q_\alpha}{Z_\alpha} \quad (19)$$

где $Q_\alpha = \chi \psi k_{f,\chi\alpha}^e + \chi M k_{f,\chi\alpha}^M$, $Q_\beta = \chi \psi k_{f,\chi\beta}^e + \chi M k_{f,\chi\beta}^M$.

3.3. Решение кинетических уравнений для молекулы NO.

Решение системы уравнений для заселенностей возбужденных состояний молекулы NO имеет вид

$$\alpha = \text{NO}(A) = \frac{\Delta_\alpha}{\Delta}, \quad \beta = \text{NO}(B) = \frac{\Delta_\beta}{\Delta}, \quad \varphi = \text{NO}(C) = \frac{\Delta_\varphi}{\Delta}, \quad (20)$$

где:

$$\Delta = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = a_{11}(a_{22}a_{33} - a_{32}a_{23}) - a_{12}(a_{21}a_{33} - a_{31}a_{23}) + a_{13}(a_{21}a_{32} - a_{31}a_{22}),$$

$$\Delta_\alpha = \begin{vmatrix} b_1 & a_{12} & a_{13} \\ b_2 & a_{22} & a_{23} \\ b_3 & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = b_1(a_{22}a_{33} - a_{23}a_{32}) - a_{12}(b_2a_{33} - b_3a_{23}) + a_{13}(b_2a_{32} - b_3a_{22}),$$

$$\Delta_\beta = \begin{vmatrix} a_{11} & b_1 & a_{13} \\ a_{21} & b_2 & a_{23} \\ a_{31} & b_3 & a_{33} \end{vmatrix} = a_{11}(b_2a_{33} - b_3a_{23}) - b_1(a_{21}a_{33} - a_{31}a_{23}) + a_{13}(a_{21}b_3 - b_2a_{31}),$$

$$\Delta_\varphi = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & b_2 \\ a_{31} & a_{32} & b_3 \end{vmatrix} = a_{11}(a_{22}b_3 - b_2a_{32}) - a_{12}(a_{21}b_3 - b_2a_{31}) + b_1(a_{21}a_{32} - a_{22}a_{31}),$$

$$a_{11} = Z_\alpha, \quad a_{12} = -\psi k_{r,\alpha\beta}^e, \quad a_{13} = -(\psi k_{r,\alpha\varphi}^e + Mk_{r,\alpha\varphi}^M),$$

$$a_{21} = \psi k_{f,\alpha\beta}^e, \quad a_{22} = -Z_\beta, \quad a_{23} = \psi k_{r,\beta\varphi}^e,$$

$$a_{31} = \psi k_{f,\alpha\varphi}^e, \quad a_{32} = \psi k_{f,\beta\varphi}^e, \quad a_{33} = -Z_\varphi,$$

$$Z_\alpha = \psi(k_{r,\chi\alpha}^e + k_{f,\alpha\beta}^e + k_{f,\alpha\varphi}^e) + M(k_{r,\chi\alpha}^M + k_{f,\alpha\varphi}^M) + (k_{v,\alpha\chi} + k_{r,\alpha}^a),$$

$$Z_\beta = \psi(k_{r,\chi\beta}^e + k_{r,\alpha\beta}^e + k_{f,\beta\varphi}^e) + Mk_{r,\chi\beta}^M + (k_{v,\beta\chi} + k_{r,\beta}^a),$$

$$Z_\varphi = \psi(k_{r,\chi\varphi}^e + k_{r,\beta\varphi}^e + k_{r,\alpha\varphi}^e) + Mk_{r,\chi\varphi}^M + k_{v,\varphi\chi},$$

$$R_\alpha = \chi(k_{f,\chi\alpha}^e + Mk_{f,\chi\alpha}^M) + [\text{N}][\text{O}]k_{f,\alpha}^a,$$

$$R_\beta = -\chi(\psi k_{f,\chi\beta}^e + Mk_{f,\chi\beta}^M) - [\text{N}][\text{O}]k_{f,\beta}^a,$$

$$R_\varphi = -\chi(\psi k_{f,\chi\varphi}^e + Mk_{f,\chi\varphi}^M).$$

Использованные в расчетах константы скорости возбуждения и дезактивации электронных состояний приведены в таблицах П.7–П.17.

4. Результаты расчетов

Расчеты заселенностей электронно-возбужденных состояний молекул N_2 , N_2^+ и NO с использованием изложенной алгебраической (e)RC-модели проводились на примере типичных распределений температур и мольных концентраций в окрестности критической линии тока возвращаемого на Землю космического зонда Stardust [4–6]. Распределения температур поступательных и колебательных степеней свободы, а также электронов для двух траекторных точек $t = 42$ с и $t = 54$ с показаны на рис. 5, а и рис. 6, а. На рис. 5, б и рис. 6, б показаны распределения относительных мольных концентраций. Эти данные заимствованы из [6].

Использовались следующие исходные данные для указанных двух траекторных точек:
 $t = 42$ с, $H = 71.9$ км, $p_\infty = 26.4$ эрг/см³, $\rho_\infty = 4.16 \times 10^{-8}$ г/см³, $T_\infty = 221$ К, $V_\infty = 12413$ м/с;
 $t = 54$ с, $H = 59.8$ км, $p_\infty = 160$ эрг/см³, $\rho_\infty = 2.34 \times 10^{-7}$ г/см³, $T_\infty = 238$ К, $V_\infty = 11136$ м/с.

Из сравнения распределений температур на рис. 5, а и рис. 6, а хорошо видно, что при $t = 42$ с течение газа в сжатом слое является существенно более неравновесным, что находит свое отражение и в распределениях мольных концентраций компонент частично ионизованного воздуха (рис. 5, б и рис. 6, б).

Представленных данных достаточно для расчета заселенностей электронно-возбужденных состояний. Такие расчеты выполнены по двум моделям. В первом случае использовалась разработанная алгебраическая (e)RC-модель, а во втором случае заселенности электронно-возбужденных состояний определялись по модели Больцмана с использованием электронной температуры [7], рассчитываемой по уравнению сохранения энергии электронов. Профили электронных температур также показаны на рис. 5, а и рис. 6, а.

Результаты расчетов заселенностей возбужденных электронных состояний показаны на рис. 7 для $t = 42$ с и на рис. 8 для $t = 54$ с.

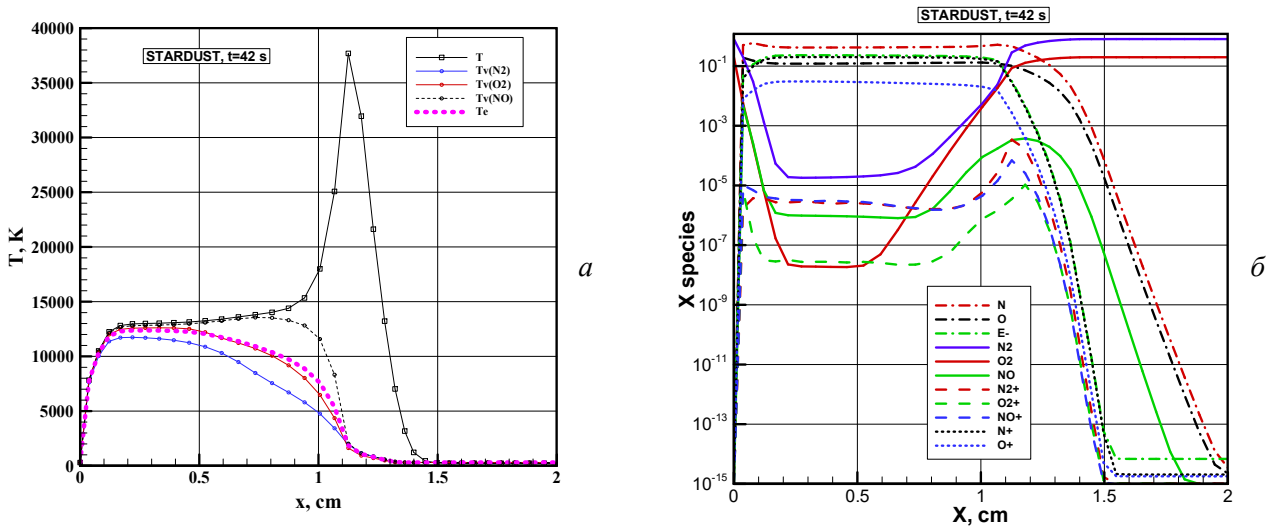


Рис. 5. Распределение поступательной и колебательных температур (а), а также объемных долей компонент частично ионизованного воздуха (б) вдоль линии торможения при $t = 42$ с

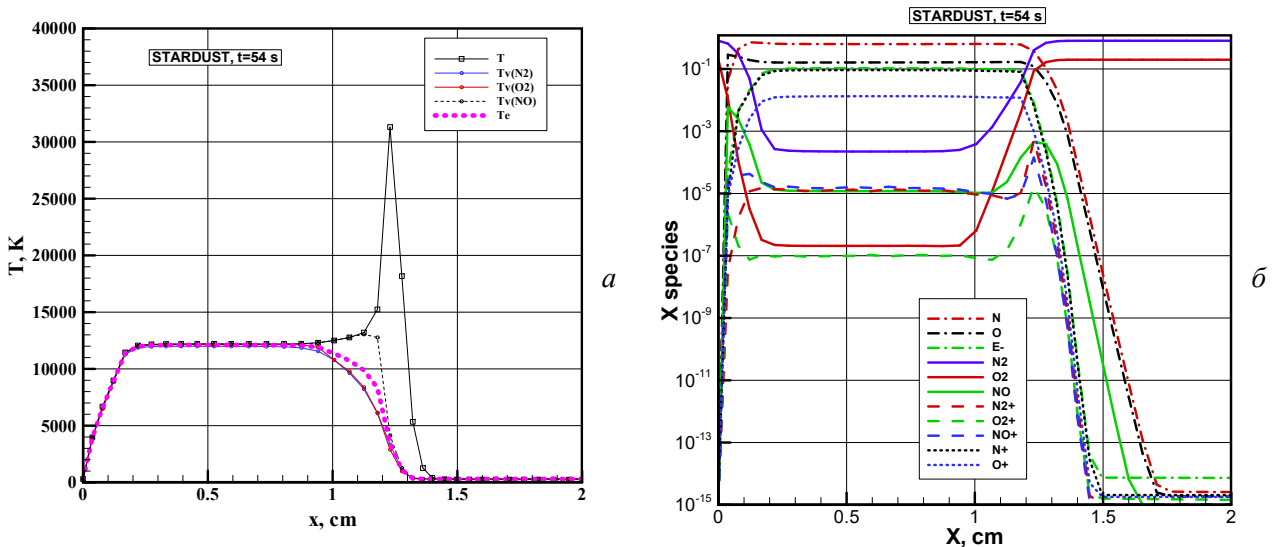


Рис. 6. Распределение поступательной и колебательных температур (а), а также объемных долей компонент частично ионизованного воздуха (б) вдоль линии торможения при $t = 54$ с

Увеличение концентраций молекул в основном состоянии для более позднего момента времени является следствием увеличения скоростного напора набегающего потока. Для молекул N_2 и N_2^+ отмечается общая тенденция снижения заселенностей более высоко возбужденных состояний. Для молекулы NO заметим относительно низкую заселенность состояния $NO(A)$.

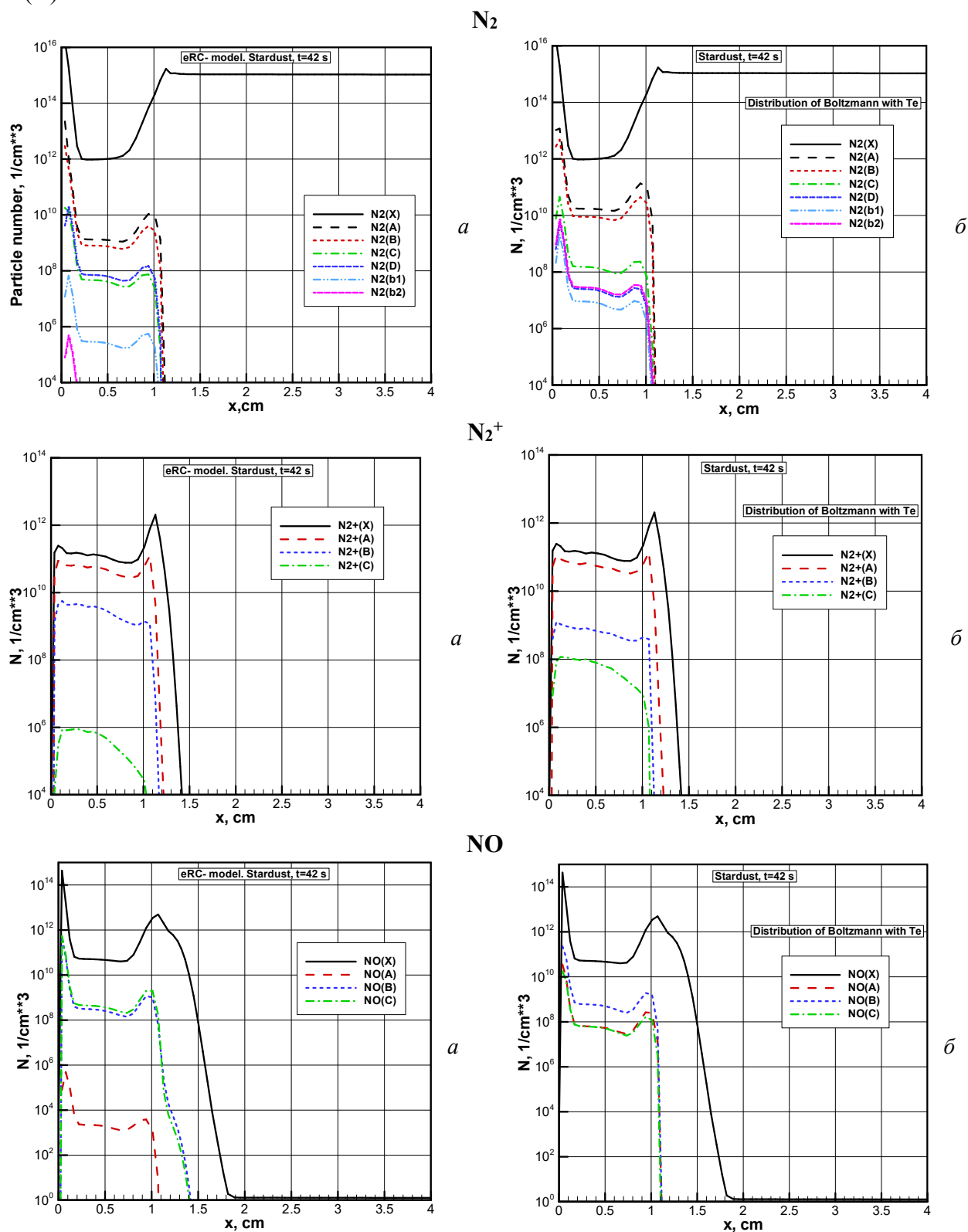


Рис. 7. Заселенность электронных состояний для двухатомных молекул N_2 , NO , N_2^+ вдоль линии торможения при $t = 42$ с, предсказанная eRC-моделями (a) и распределением Больцмана (b) с T_e .

Сравнение результатов расчетов по (e)RC-модели и модели Больцмана показывает увеличение различия по мере увеличения энергии возбужденных состояний. Весьма значительные различия в излучательных способностях ударных волн при использовании (e)RC и больцмановской моделей, отмечавшиеся ранее в работе [35] вероятнее всего связаны с отмеченными различиями. При этом заметим, что столь заметные различия в заселенностях (на 2–3 порядка) являются в известной мере положительным фактором, позволяющим при детальном исследовании получить более достоверные данные по вероятностям квантовых переходов и правильно выбранной кинетической модели. Что касается изложенной алгебраической (e)RC-модели, то результатами расчетов подтверждена ее высокая экономичность по затратам компьютерного времени.

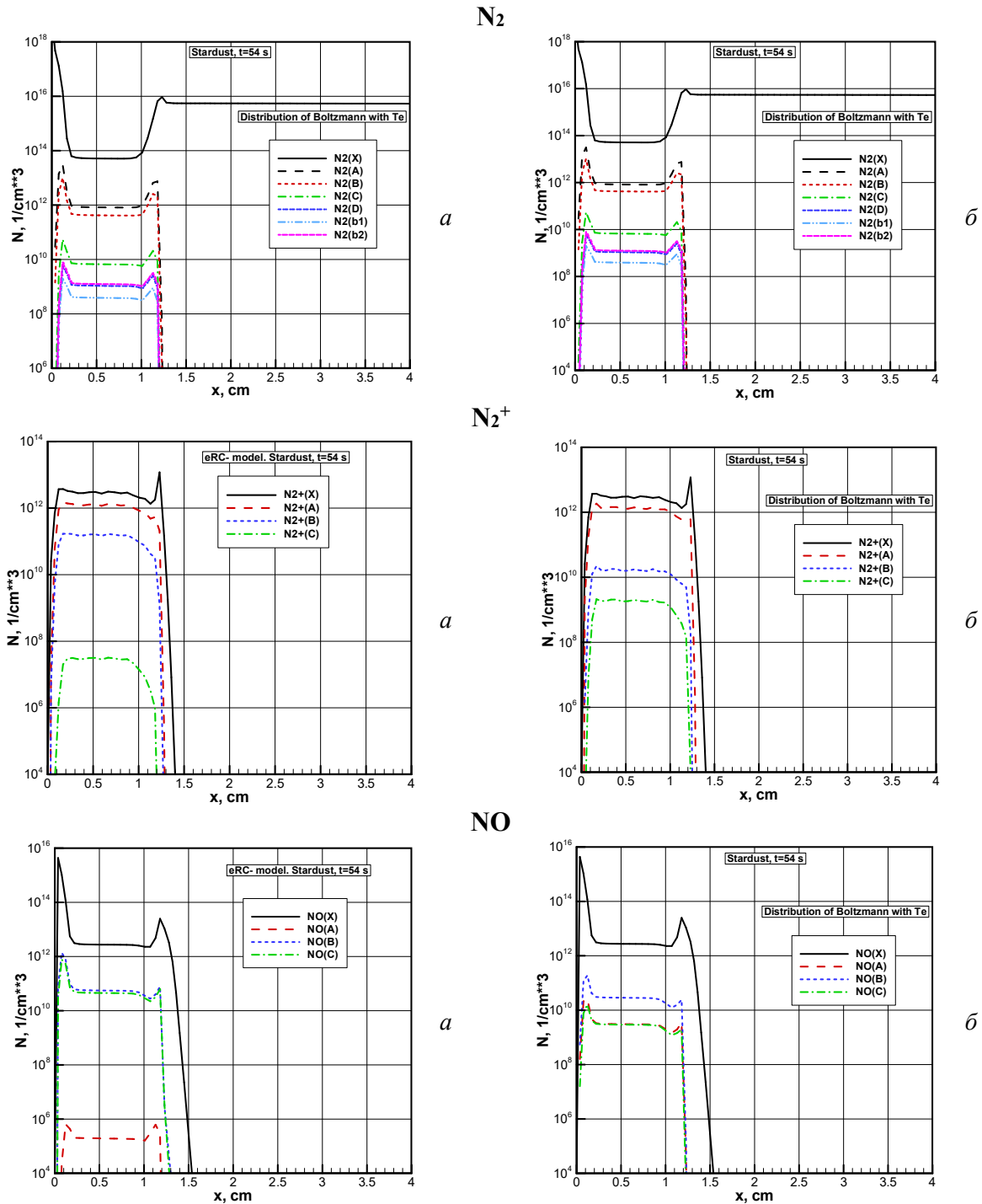


Рис. 8. Заселенность электронных состояний для двухатомных молекул N_2 , NO , N_2^+ вдоль линии торможения при $t = 54$ с, предсказанная eRC-моделями (а) и распределением Больцмана (б) с T_e

5. Заключение

Дано подробное изложение экономичной алгебраической квазистационарной (QSS) электронно-радиационно-столкновительной (e)RC-модели, предназначенной для расчета неравновесного излучения электронно-колебательных полос двухатомных молекул. В качестве примера использования разработанной кинетической модели приведены результаты расчетов заселенностей электронно-возбужденных квантовых состояний молекул N_2 , N_2^+ и NO для условий течения в окрестности критической линии тока в сжатом слое, формируемым у поверхности возвращаемого на Землю космического зонда Stardust.

Расчеты выполнены с использованием разработанной кинетической модели и по Больцмановской модели распределения возбужденных состояний с электронной температурой, рассчитанной по радиационно-газодинамической модели. Показано, что различия в заселенностях возбужденных состояний могут достигать 2х–3х порядков.

Приложение

Таблица П.1

Электронные полосы молекул N_2 , N_2^+ и NO

N_2		$\Delta\omega$, cm^{-1}	N_2^+		$\Delta\omega$, cm^{-1}
$N_2(A^3\Sigma_u^+) \rightarrow N_2(X^1\Sigma_g^+) + h\nu$	V–K	1000 ÷ 75000	$N_2^+(A^2\Pi_u) \rightarrow N_2^+(X^2\Sigma_g^+) + h\nu$	M	1000 ÷ 38000
$N_2(B^3\Pi_g) \rightarrow N_2(A^3\Sigma_u^+) + h\nu$	1+	10000 ÷ 25000	$N_2^+(B^2\Sigma_u^+) \rightarrow N_2^+(X^2\Sigma_g^+) + h\nu$	1–	7000 ÷ 40000
$N_2(C^3\Pi_g) \rightarrow N_2(B^3\Pi_g) + h\nu$	2+	10000 ÷ 40000	$N_2^+(C^2\Sigma_u^+) \rightarrow N_2^+(X^2\Sigma_g^+) + h\nu$	2–	27000 ÷ 95000
$N_2(D^3\Sigma_u^+) \rightarrow N_2(B^3\Pi_g) + h\nu$	4+	28500 ÷ 50000			
$N_2(b^1\Sigma_u^+) \rightarrow N_2(X^1\Sigma_g^+) + h\nu$	BH2	54000 ÷ 120000			
$N_2(b^1\Pi_u) \rightarrow N_2(X^1\Sigma_g^+) + h\nu$	BH1	74000 ÷ 105000			
NO		$\Delta\omega$, cm^{-1}			
$NO(A^2\Sigma^+) \rightarrow NO(X^2\Pi) + h\nu$	γ	16000 ÷ 62000			
$NO(B^2\Pi) \rightarrow NO(X^2\Pi) + h\nu$	β	16000 ÷ 60000			
$NO(C^2\Pi) \rightarrow NO(X^2\Pi) + h\nu$	δ	20000 ÷ 65000			

Таблица П.2

Обозначения возбужденных уровней в RC-модели N_2 , N_2^+ и NO

Краткое обозначение электронного уровня	Концентрации	Краткое обозначение электронного уровня	Концентрации	Краткое обозначение электронного уровня	Концентрации
$N_2(X^1\Sigma_g^+) = N_2(X)$	χ	$N_2^+(X^2\Sigma_g^+) = N_2^+(X)$	χ	$NO(X^2\Pi) = NO(X)$	χ
$N_2(A^3\Sigma_u^+) = N_2(A)$	α	$N_2^+(A^2\Pi_u) = N_2^+(A)$	α	$NO(A^2\Sigma^+) = NO(A)$	α
$N_2(B^3\Pi_g) = N_2(B)$	β	$N_2^+(B^2\Sigma_u^+) = N_2^+(B)$	β	$NO(B^2\Pi) = NO(B)$	β
$N_2(C^3\Pi_g) = N_2(C)$	φ	$N_2^+(C^2\Sigma_u^+) = N_2^+(C)$	φ	$NO(C^2\Pi) = NO(C)$	φ
$N_2(D^3\Sigma_u^+) = N_2(D)$	δ				
$N_2(b^1\Sigma_u^+) = N_2(B1)$	ξ				
$N_2(b^1\Pi_u) = N_2(B2)$	η				

Таблица П.3

Энергия и статистический вес учтенных электронных состояний [82]

	$T_e, \text{см}^{-1}$	g		$T_e, \text{см}^{-1}$	g		$T_e, \text{см}^{-1}$	g
$N_2(X^1\Sigma_g^+)$	0	1	$NO(X^2\Pi)$	0	4	$N_2^+(X^2\Sigma_g^+)$	0	2
$N_2(A^3\Sigma_n^+)$	50203.	3	$NO(A^2\Sigma^+)$	43965.7	2	$N_2^+(A^2\Pi_n)$	9167.	4
$N_2(B^3\Pi_g)$	59619.	6	$NO(B^2\Pi)$	45913.	4	$N_2^+(B^2\Sigma_n^+)$	25461.	2
$N_2(C^3\Pi_g)$	89137.	6	$NO(C^2\Pi)$	52126.	4	$N_2^+(C^2\Sigma_n^+)$	64608.	4
$N_2(D^3\Sigma_n^+)$	104746.	3						
$N_2(b'^1\Sigma_n^+)$	104498.	1						
$N_2(b^1\Pi_n)$	101675.	2						

Таблица П.4а

Классификация процессов возбуждения/деактивации электронных состояний молекулы по типу квантовых переходов для молекулы N_2

Реакция возбуждения электронным ударом			
E1	$N_2(X) + e \rightleftharpoons N_2(A) + e$	$k_{f,\chi\alpha}^e = \text{FE1}, k_{r,\chi\alpha}^e = \text{RE1}$	
E2	$N_2(X) + e \rightleftharpoons N_2(B) + e$	$k_{f,\chi\beta}^e = \text{FE2}, k_{r,\chi\beta}^e = \text{RE2}$	
E3	$N_2(B) + e \rightleftharpoons N_2(C) + e$	$k_{f,\beta\varphi}^e = \text{FE3}, k_{r,\beta\varphi}^e = \text{RE3}$	
E4	$N_2(B) + e \rightleftharpoons N_2(D) + e$	$k_{f,\beta\delta}^e = \text{FE4}, k_{r,\beta\delta}^e = \text{RE4}$	
E5	$N_2(X) + e \rightleftharpoons N_2(C) + e$	$k_{f,\chi\varphi}^e = \text{FE5}, k_{r,\chi\varphi}^e = \text{RE5}$	
E6	$N_2(X) + e \rightleftharpoons N_2(D) + e$	$k_{f,\chi\delta}^e = \text{FE6}, k_{r,\chi\delta}^e = \text{RE6}$	
E7	$N_2(X) + e \rightleftharpoons N_2(b'^1\Sigma_u^+) + e$	$k_{f,\chi\xi}^e = \text{FE7}, k_{r,\chi\xi}^e = \text{RE7}$	
E8	$N_2(X) + e \rightleftharpoons N_2(b'\Pi) + e$	$k_{f,\chi\eta}^e = \text{FE8}, k_{r,\chi\eta}^e = \text{RE8}$	
E9	$N_2(A) + e \rightleftharpoons N_2(B) + e$	$k_{f,\alpha\beta}^e = \text{FE9}, k_{r,\alpha\beta}^e = \text{RE9}$	
Реакция возбуждения тяжелыми частицами			
M1	$N_2(X) + M \rightleftharpoons N_2(A) + M$	$k_{f,\chi\alpha}^M \equiv \text{FM1}, k_{r,\chi\alpha}^M \equiv \text{RM1}$	
M2	$N_2(A) + M \rightleftharpoons N_2(B) + M$	$k_{f,\alpha\beta}^M \equiv \text{FM2}, k_{r,\alpha\beta}^M \equiv \text{RM2}$	
Реакция ассоциативной рекомбинации			
A1	$N + N + M \rightleftharpoons N_2(A) + M$	$k_{f,\alpha}^a \equiv \text{FA1}, k_{r,\alpha}^a \equiv \text{RA1}$	
A2	$N + N + M \rightleftharpoons N_2(B) + M$	$k_{f,\beta}^a \equiv \text{FA2}, k_{r,\beta}^a \equiv \text{RA2}$	
Радиационная дезактивация			
P1	$N_2(A) \rightarrow N_2(X) + h\nu$	(VK)	$k_{v,\alpha\chi} = \text{P1}$
P2	$N_2(B) \rightarrow N_2(A) + h\nu$	1+	$k_{v,\beta\alpha} = \text{P2}$
P3	$N_2(C) \rightarrow N_2(B) + h\nu$	2+	$k_{v,\varphi\beta} = \text{P3}$
P4	$N_2(D) \rightarrow N_2(B) + h\nu$	4+	$k_{v,\delta\beta} = \text{P4}$
P5	$N_2(b'^1\Sigma_u^+) \rightarrow N_2(X) + h\nu$	BH2	$k_{v,\xi\chi} = \text{P5}$
P6	$N_2(b'\Pi) \rightarrow N_2(X) + h\nu$	BH1	$k_{v,\eta\chi} = \text{P6}$

Таблица П.46

 Перечень квантовых процессов для каждого электронного состояния молекулы N₂

		Название полосы	М	Р	Е	А	Обозначение процесса на диаграмме D1		
N ₂ (A)	N ₂ (X)+e ⇌ N ₂ (A)+e	VK	M1	P1	E1	A1	A1		
	N ₂ (A) → N ₂ (X)+hν						A2		
	N+N+M → N ₂ (A)+M						A3		
	N ₂ (X)+M → N ₂ (A)+M								A4
	N ₂ (A)+e ⇌ N ₂ (B)+e						E9		A5
	N ₂ (A)+M ⇌ N ₂ (B)+M				M2				A6
	N ₂ (B) → N ₂ (A)+hν					P2			A7
N ₂ (B)	N ₂ (X)+e ⇌ N ₂ (B)+e	1+	M2	P2	E2	A2	B1		
	N ₂ (B) → N ₂ (A)+hν						B2		
	N+N+M → N ₂ (B)+M			B3					
	N ₂ (A)+M → N ₂ (B)+M			B4					
	N ₂ (B)+e → N ₂ (C)+e				E3		B5		
	N ₂ (C) → N ₂ (B)+hν			P3			B6		
	N ₂ (B)+e → N ₂ (D)+e	2+			E4		B7		
	N ₂ (D) → N ₂ (B)+hν			P4			B8		
	N ₂ (A)+e ⇌ N ₂ (B)+e				E9			B9	
N ₂ (C)	N ₂ (X)+e ⇌ N ₂ (C)+e	2+		P3	E5		C1		
	N ₂ (C) → N ₂ (B)+hν		C2						
	N ₂ (B)+e ⇌ N ₂ (C)+e				E3		C3		
N ₂ (D)	N ₂ (B)+e ⇌ N ₂ (D)+e	4+		P4	E4		D1		
	N ₂ (D) → N ₂ (B)+hν		D2						
	N ₂ (X)+e ⇌ N ₂ (D)+e				E6		D3		
N ₂ (b'Σ)	N ₂ (X)+e ⇌ N ₂ (b'Σ)+e	BH2		P5	E7		S1		
	N ₂ (b'Σ) → N ₂ (X)+hν		S2						
N ₂ (b'Π)	N ₂ (X)+e ⇌ N ₂ (b'Π)+e	BH1		P6	E8		P1		
	N ₂ (b'Π) → N ₂ (X)+hν		P2						

Таблица П.5а

Классификация процессов возбуждения/деактивации электронных состояний молекулы по типу квантовых переходов для молекулы N_2^+

Реакция возбуждения электронным ударом		
E1	$N_2^+(X) + e \rightleftharpoons N_2^+(A) + e$	$k_{f,\chi\alpha}^e = FE1, k_{r,\chi\alpha}^e = RE1$
E2	$N_2^+(X) + e \rightleftharpoons N_2^+(B) + e$	$k_{f,\chi\beta}^e = FE2, k_{r,\chi\beta}^e = RE2$
E3	$N_2^+(X) + e \rightleftharpoons N_2^+(C) + e$	$k_{f,\chi\varphi}^e = FE3, k_{r,\chi\varphi}^e = RE3$
E4	$N_2^+(A) + e \rightleftharpoons N_2^+(B) + e$	$k_{f,\alpha\beta}^e = FE4, k_{r,\alpha\beta}^e = RE4$
Реакция возбуждения тяжелыми частицами		
M1	$N_2^+(X) + M \rightleftharpoons N_2^+(A) + M$	$k_{f,\chi\alpha}^M = FM1, k_{r,\chi\alpha}^M = RM1$
M2	$N_2^+(X) + M \rightleftharpoons N_2^+(B) + M$	$k_{f,\chi\beta}^M = FM2, k_{r,\chi\beta}^M = RM2$
M3	$N_2^+(X) + M \rightleftharpoons N_2^+(C) + M$	$k_{f,\chi\varphi}^M = FM3, k_{r,\chi\varphi}^M = RM3$
M4	$N_2^+(A) + M \rightleftharpoons N_2^+(B) + M$	$k_{f,\alpha\varphi}^M = FM4, k_{r,\alpha\varphi}^M = RM4$
Радиационная дезактивация		
P1	$N_2^+(A) \rightarrow N_2^+(X) + h\nu$	$(M), k_{v,\alpha\chi} = P1$
P2	$N_2^+(B) \rightarrow N_2^+(X) + h\nu$	$(1-), k_{v,\beta\chi} = P2$
P3	$N_2^+(C) \rightarrow N_2^+(X) + h\nu$	$(2-), k_{v,\varphi\chi} = P3$

Таблица П.5б

Перечень квантовых процессов для каждого электронного состояния молекулы N_2^+

Кинетические процессы с участием выделенных уровней			Обозначение процесса на диаграмме D2
$N_2^+(A)$	$N_2^+(X) + e \rightleftharpoons N_2^+(A) + e$	$k_{f,\chi\alpha}^e = FE1, k_{r,\chi\alpha}^e = RE1$	A1
	$N_2^+(A) \rightarrow N_2^+(X) + h\nu$	$(M), k_{v,\alpha\chi} = P1$	A2
	$N_2^+(X) + M \rightleftharpoons N_2^+(A) + M$	$k_{f,\chi\alpha}^M = FM1, k_{r,\chi\alpha}^M = RM1$	A3
	$N_2^+(A) + e \rightleftharpoons N_2^+(B) + e$	$k_{f,\alpha\beta}^e = FE4, k_{r,\alpha\beta}^e = RE4$	A4
	$N_2^+(A) + M \rightleftharpoons N_2^+(B) + M$	$k_{f,\alpha\varphi}^M = FM4, k_{r,\alpha\varphi}^M = RM4$	A5
$N_2^+(B)$	$N_2^+(X) + e \rightleftharpoons N_2^+(B) + e$	$k_{f,\chi\beta}^e = FE2, k_{r,\chi\beta}^e = RE2$	B1
	$N_2^+(B) \rightarrow N_2^+(X) + h\nu$	$(1-), k_{v,\beta\chi} = P2$	B2
	$N_2^+(A) + e \rightleftharpoons N_2^+(B) + e$	$k_{f,\alpha\beta}^e = FE4, k_{r,\alpha\beta}^e = RE4$	B3
	$N_2^+(X) + M \rightleftharpoons N_2^+(B) + M$	$k_{f,\chi\beta}^M = FM2, k_{r,\chi\beta}^M = RM2$	B4
	$N_2^+(A) + M \rightleftharpoons N_2^+(B) + M$	$k_{f,\alpha\varphi}^M = FM4, k_{r,\alpha\varphi}^M = RM4$	B5
$N_2^+(C)$	$N_2^+(X) + e \rightleftharpoons N_2^+(C) + e$	$k_{f,\chi\varphi}^e = FE3, k_{r,\chi\varphi}^e = RE3$	C1
	$N_2^+(C) \rightarrow N_2^+(X) + h\nu$	$(2-), k_{v,\varphi\chi} = P3$	C2
	$N_2^+(X) + M \rightleftharpoons N_2^+(C) + M$	$k_{f,\chi\varphi}^M = FM3, k_{r,\chi\varphi}^M = RM3$	C3

Таблица П.6а

Классификация процессов возбуждения/деактивации электронных состояний молекулы по типу квантовых переходов для молекулы NO

Реакция возбуждения электронным ударом			Радиационная дезактивация		
E1	$\text{NO}(X) + e \rightleftharpoons \text{NO}(A) + e$	$k_{f,\chi\alpha}^e = \text{FE1}, k_{r,\chi\alpha}^e = \text{RE1}$	P1	$\text{NO}(A) \rightarrow \text{NO}(X) + h\nu$	$k_{v,\alpha\chi} = \text{P1}$
E2	$\text{NO}(X) + e \rightleftharpoons \text{NO}(B) + e$	$k_{f,\chi\beta}^e = \text{FE2}, k_{r,\chi\beta}^e = \text{RE2}$	P2	$\text{NO}(B) \rightarrow \text{NO}(X) + h\nu$	$k_{v,\beta\chi} = \text{P2}$
E3	$\text{NO}(X) + e \rightleftharpoons \text{NO}(C) + e$	$k_{f,\chi\varphi}^e = \text{FE3}, k_{r,\chi\varphi}^e = \text{RE3}$	P3	$\text{NO}(C) \rightarrow \text{NO}(X) + h\nu$	$k_{v,\varphi\chi} = \text{P3}$
E4	$\text{NO}(A) + e \rightleftharpoons \text{NO}(B) + e$	$k_{f,\alpha\beta}^e = \text{FE4}, k_{r,\alpha\beta}^e = \text{RE4}$	Ассоциативное возбуждение		
E5	$\text{NO}(B) + e \rightleftharpoons \text{NO}(C) + e$	$k_{f,\beta\varphi}^e = \text{FE5}, k_{r,\beta\varphi}^e = \text{RE5}$	A1	$\text{N} + \text{O} \rightarrow \text{NO}(A)$	$k_{f,\alpha}^a = \text{A1}$
E6	$\text{NO}(A) + e \rightleftharpoons \text{NO}(C) + e$	$k_{f,\alpha\varphi}^e = \text{FE6}, k_{r,\alpha\varphi}^e = \text{RE6}$	A2	$\text{N} + \text{O} \rightarrow \text{NO}(B)$	$k_{f,\beta}^a = \text{A2}$
Реакция возбуждения тяжелыми частицами					
M1	$\text{NO}(X) + M \rightleftharpoons \text{NO}(A) + M$	$k_{f,\chi\alpha}^M = \text{FM1}, k_{r,\chi\alpha}^M = \text{RM1}$			
M2	$\text{NO}(X) + M \rightleftharpoons \text{NO}(B) + M$	$k_{f,\chi\beta}^M = \text{FM2}, k_{r,\chi\beta}^M = \text{RM2}$			
M3	$\text{NO}(X) + M \rightleftharpoons \text{NO}(C) + M$	$k_{f,\chi\varphi}^M = \text{FM3}, k_{r,\chi\varphi}^M = \text{RM3}$			
M4	$\text{NO}(A) + M \rightleftharpoons \text{NO}(C) + M$	$k_{f,\alpha\varphi}^M = \text{FM4}, k_{r,\alpha\varphi}^M = \text{RM4}$			

Таблица П.6б

Перечень квантовых процессов для каждого электронного состояния молекулы NO

Кинетические процессы с участием выделенных уровней			Обозначение процесса на диаграмме D3
NO(A)	$\text{NO}(X) + e \rightleftharpoons \text{NO}(A) + e$	$k_{f,\chi\alpha}^e = \text{FE1}, k_{r,\chi\alpha}^e = \text{RE1}$	A1
	$\text{NO}(A) \rightarrow \text{NO}(X) + h\nu$	$k_{v,\alpha\chi} = \text{P1}$	A2
	$\text{N} + \text{O} \rightarrow \text{NO}(A)$	$k_{f,\alpha}^a = \text{A1}$	A3
	$\text{NO}(X) + M \rightleftharpoons \text{NO}(A) + M$	$k_{f,\chi\alpha}^M = \text{FM1}, k_{r,\chi\alpha}^M = \text{RM1}$	A4
	$\text{NO}(A) + e \rightleftharpoons \text{NO}(B) + e$	$k_{f,\alpha\beta}^e = \text{FE4}, k_{r,\alpha\beta}^e = \text{RE4}$	A5
	$\text{NO}(A) + e \rightleftharpoons \text{NO}(C) + e$	$k_{f,\alpha\varphi}^e = \text{FE6}, k_{r,\alpha\varphi}^e = \text{RE6}$	A6
NO(B)	$\text{NO}(X) + e \rightleftharpoons \text{NO}(B) + e$	$k_{f,\chi\beta}^e = \text{FE2}, k_{r,\chi\beta}^e = \text{RE2}$	B1
	$\text{NO}(B) \rightarrow \text{NO}(X) + h\nu$	$k_{v,\beta\chi} = \text{P2}$	B2
	$\text{N} + \text{O} \rightarrow \text{NO}(B)$	$k_{f,\beta}^a = \text{A2}$	B3
	$\text{NO}(A) + e \rightleftharpoons \text{NO}(B) + e$	$k_{f,\alpha\beta}^e = \text{FE4}, k_{r,\alpha\beta}^e = \text{RE4}$	B4
	$\text{NO}(B) + e \rightleftharpoons \text{NO}(C) + e$	$k_{f,\beta\varphi}^e = \text{FE5}, k_{r,\beta\varphi}^e = \text{RE5}$	B5
NO(C)	$\text{NO}(X) + e \rightleftharpoons \text{NO}(C) + e$	$k_{f,\chi\varphi}^e = \text{FE3}, k_{r,\chi\varphi}^e = \text{RE3}$	C1
	$\text{NO}(C) \rightarrow \text{NO}(X) + h\nu$	$k_{v,\varphi\chi} = \text{P3}$	C2
	$\text{NO}(B) + e \rightleftharpoons \text{NO}(C) + e$	$k_{f,\beta\varphi}^e = \text{FE5}, k_{r,\beta\varphi}^e = \text{RE5}$	C3
	$\text{NO}(A) + e \rightleftharpoons \text{NO}(C) + e$	$k_{f,\alpha\varphi}^e = \text{FE6}, k_{r,\alpha\varphi}^e = \text{RE6}$	C4
	$\text{NO}(X) + M \rightleftharpoons \text{NO}(C) + M$	$k_{f,\chi\varphi}^M = \text{FM3}, k_{r,\chi\varphi}^M = \text{RM3}$	C5

Таблица П.7

Электронное возбуждение N₂ при столкновениях с электронами

						$A_f,$ (см ³ /моль) ⁿ⁻¹ /с	n_f	T_{ex}, K	$A_r,$ (см ³ /моль) ⁿ⁻¹ /с	n_r	T_{ex}, K		
1	N2	E	↔	N2A	E	0.2240E+06	0.1620E+00	0.50204E+05	0.2240E+06	0.1620E+00	0.00E+00	$X^1\Sigma_g^+ \leftrightarrow A^3\Sigma_u^+$	$\Delta S \neq 0, VK, [38]$
2	N2	E	↔	N2B	E	6.6860E+17	-0.456E+00	0.85851E+05	6.6860E+17	-0.4560E+00	0.00E+00	$X^1\Sigma_g^+ \leftrightarrow B^3\Pi_g$	[22, 39]
3	N2B	E	↔	N2C	E	0.1110E+17	0.0319E+00	0.29518E+05	0.1110E+17	0.0319E+00	0.00E+00	$B^3\Pi_g \leftrightarrow C^3\Pi_g$	2+ [38]
4	N2B	E	↔	N2D	E	0.6130E+15	0.1310E+00	0.44028E+05	0.6130E+15	0.1310E+00	0.00E+00	$B^3\Pi_g \leftrightarrow D^3\Sigma_u^+$	4+ [38]
5	N2	E	↔	N2C	E	5.3400E+20	-0.1130E+01	0.124966E+06	5.3400E+20	-0.1130E+01	0.00E+00	$X^1\Sigma_g^+ \leftrightarrow C^3\Pi_g$	[22, 39]
6	N2	E	↔	N2D	E	0.2390E+14	0.5000E+00	0.10357E+06	0.2390E+14	0.5000E+00	0.00E+00	$X^1\Sigma_g^+ \leftrightarrow D^3\Sigma_u^+$	[38]
7	N2	E	↔	N2B1	E	0.1260E+13	0.3060E+00	0.10450E+06	0.1260E+13	0.3060E+00	0.00E+00	$X^1\Sigma_g^+ \leftrightarrow b^1\Sigma_u^+$	ВН2 [38]
8	N2	E	↔	N2B2	E	0.1630E+13	0.3040E+00	0.101680E+06	0.1630E+13	0.3040E+00	0.00E+00	$X^1\Sigma_g^+ \leftrightarrow b^1\Pi_u$	ВН1 [38]
9	N2A	E	↔	N2B	E	0.39059E+17	-0.183E+00	0.94152E+04	0.39059E+17	-0.183E+00	0.00E+00	$A^3\Sigma_u^+ \leftrightarrow B^3\Pi_g$	[38]

Таблица П.8

Электронное возбуждение N₂⁺ при столкновениях с электронами

						$A_f,$ (см ³ /моль) ⁿ⁻¹ /с	n_f	T_{ex}, K	$A_r,$ (см ³ /моль) ⁿ⁻¹ /с	n_r	T_{ex}, K		
1	N2+	E	↔	N2+A	E	0.262E+17	-0.2230E+00	0.91672E+04	0.262E+17	-0.2230E+00	0.00E+00	$X^2\Sigma_g^+ \leftrightarrow A^2\Pi_u$	М [38]
2	N2+	E	↔	N2+B	E	0.181E+16	-0.0237E+00	0.25461E+05	0.181E+16	-0.0237E+00	0.00E+00	$X^2\Sigma_g^+ \leftrightarrow B^2\Sigma_u^+$	1-[38]
3	N2+	E	↔	N2+C	E	0.151E+13	0.2290E+00	0.64608E+05	0.151E+13	0.2290E+00	0.00E+00	$X^2\Sigma_g^+ \leftrightarrow C^2\Sigma_u^+$	2-[38]
4	N2+A	E-	↔	N2+B	E	6.100E+14	0.0000E+00	0.23500E+05	6.100E+14	0.0000E+00	0.00E+00	$A^2\Pi_u \leftrightarrow B^2\Sigma_u^+$	[40]

Таблица П.9

Электронное возбуждение NO при столкновениях с электронами

						$A_f,$ (см ³ /моль) ⁿ⁻¹ /с	n_f	T_{ex}, K	$A_r,$ (см ³ /моль) ⁿ⁻¹ /с	n_r	T_{ex}, K		
1	NO	E	↔	NOA	E	0.118E+14	0.127E+00	0.43904E+05	0.118E+14	0.127E+00	0.00000E+00	$X^2\Pi \leftrightarrow A^2\Sigma^+$	γ [38]
2	NO	E	↔	NOB	E	0.292E+14	0.136E+00	0.45869E+05	0.292E+14	0.136E+00	0.00000E+00	$X^2\Pi \leftrightarrow B^2\Pi$	β [38]
3	NO	E	↔	NOC	E	0.529E+14	0.173E+00	0.52066E+05	0.529E+14	0.173E+00	0.00000E+00	$X^2\Pi \leftrightarrow C^2\Pi$	δ [38]
4	NOA	E	↔	NOB	E	2.888E+16	-0.623E+00	0.18839E+05	2.889E+16	-0.620E+00	0.16011E+05	$A^2\Sigma^+ \leftrightarrow B^3\Pi_g$	[22, 41]
5	NOB	E	↔	NOC	E	3.980E+15	-0.650E+00	0.13463E+05	3.980E+15	-0.650E+00	0.43760E+04	$B^3\Pi_g \leftrightarrow C^2\Pi$	[22, 41]
6	NOA	E	↔	NOC	E	1.640E+17	-0.800E+00	0.15550E+05	1.640E+17	-0.800E+00	0.36350E+04	$A^2\Sigma^+ \leftrightarrow C^2\Pi$	[22 41]

Таблица П.10

Электронное возбуждение N₂ тяжелыми частицами

						$A_f,$ (см ³ /моль) ⁿ⁻¹ /с	n_f	T_{ex}, K	$A_r,$ (см ³ /моль) ⁿ⁻¹ /с	n_r	T_{ex}, K	
1	N2	M	↔	N2A	M	7.01100E+12	0.000E+00	0.72294E+05	7.01100E+12	0.000E+00	0.000E+00	$X^1\Sigma_g^+ \leftrightarrow A^3\Sigma_u^+$ [42]
2	N2A	M	↔	N2B	M	4.71800E+13	0.000E+00	0.13555E+05	4.71800E+13	0.000E+00	0.000E+00	$X^1\Sigma_g^+ \leftrightarrow B^3\Pi_g$ [42]

Таблица П.11

Электронное возбуждение N₂⁺ тяжелыми частицами

						$A_f,$ (см ³ /моль) ⁿ⁻¹ /с	n_f	T_{ex}, K	$A_r,$ (см ³ /моль) ⁿ⁻¹ /с	n_r	T_{ex}, K	
1	N2+	M	↔	N2+A	M	1.810E+06	0.000E+00	0.13200E+05	1.810E+06	0.000E+00	0.000E+00	$X^2\Sigma_g^+ \leftrightarrow A^2\Pi_u$ [43,44]
2	N2+	M	↔	N2+B	M	4.938E+14	0.000E+00	0.33501E+00	4.938E+14	0.000E+00	0.000E+00	$X^2\Sigma_g^+ \leftrightarrow B^2\Sigma_u^+$ [22,42]
3	N2+	M	↔	N2+C	M	0.000E-00	0.000E+00	0.00000E+00	3.000E+13	0.000E+00	0.000E+00	$X^2\Sigma_g^+ \leftrightarrow C^2\Sigma_u^+$ (по аналогии [40])
4	N2+A	M	↔	N2+B	M	0.000E+00	0.000E+00	0.00000E+00	3.000E+13	0.000E+00	0.000E+00	$A^2\Pi_u \leftrightarrow B^2\Sigma_u^+$ [40]

Таблица П.12

Электронное возбуждение NO тяжелыми частицами

						$A_f,$ (см ³ /моль) ^{n-1/c}	n_f	T_{ex}, K	$A_r,$ (см ³ /моль) ^{n-1/c}	n_r	T_{ex}, K	
1	NO	M	↔	NOA	M	9.51500E+10	0.000E+00	0.63222E+05	9.51500E+10	0.000E+00	0.000E+00	$X^2\Pi \leftrightarrow A^2\Sigma^+$ [22, 42]
2	NO	M	↔	NOB	M	6.02200E+12	0.500E+00	0.00000E+00	6.02200E+12	0.500E+00	0.000E+00	$X^2\Pi \leftrightarrow B^2\Pi$ [22, 42]
3	NO	M	↔	NOC	M	6.02200E+12	0.500E+00	0.00000E+00	6.02200E+12	0.500E+00	0.000E+00	$X^2\Pi \leftrightarrow C^2\Pi$ [40]
4	NOA	M	↔	NOC	M	1.38500E+15	0.000E+00	0.11915E+05	1.38500E+15	0.000E+00	0.000E+00	$A^2\Sigma^+ \leftrightarrow C^2\Pi$ [22, 42]

Таблица П.13

Ассоциативное возбуждение N₂

						$A_f,$ (см ³ /моль) ^{n-1/c}	n_f	T_{ex}, K	$A_r,$ (см ³ /моль) ^{n-1/c}	n_r	T_{ex}, K	
1	N	N	M	↔	N2A	M	4.90000E+07	-0.350E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	$A^3\Sigma_u^+$ [40, 45]
2	N	N	M	↔	N2B	M	4.90000E+07	-0.350E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	$B^3\Pi_g$ (по аналогии [40, 45])

Таблица П.14

Ассоциативное возбуждение NO

						$A_f,$ (см ³ /моль) ^{n-1/c}	n_f	T_{ex}, K	$A_r,$ (см ³ /моль) ^{n-1/c}	n_r	T_{ex}, K		
1	N	O		↔	NOA		5.230E+07	-0.350E+00	0.000E+00	5.230E+07	-0.350E+00	0.000E+00	$A^3\Sigma_u^+$ [40, 43]
2	N	O		↔	NOB		3.022E+07	-0.350E+00	0.000E+00	3.022E+07	-0.350E+00	0.000E+00	$B^3\Pi_g$ [40, 43]

Таблица П.15

Радиационная деактивация N₂ [38]

					<i>A</i> , 1/с	
1	N2A	→	N2X	<i>hν</i>	9.55000E+00	<i>A</i> ³ Σ _u ⁺
2	N2B	→	N2A	<i>hν</i>	0.35900E+07	<i>B</i> ³ Π _g
3	N2C	→	N2B	<i>hν</i>	0.13400E+09	<i>C</i> ³ Π _g
4	N2D	→	N2B	<i>hν</i>	0.70700E+08	<i>D</i> ³ Σ _u ⁺
5	N2B1	→	N2X	<i>hν</i>	0.42600E+11	<i>b</i> ¹ Σ _u ⁺
6	N2B2	→	N2X	<i>hν</i>	0.51600E+09	<i>b</i> ¹ Π _u

Таблица П.16

Радиационная деактивация NO [38]

					<i>A</i> , 1/с	
1	NOA	→	NOX	<i>hν</i>	0.46000E+08	<i>A</i> ² Σ ⁺
2	NOB	→	NOX	<i>hν</i>	0.86100E+08	<i>B</i> ² Π
3	NOC	→	NOX	<i>hν</i>	0.96300E+08	<i>C</i> ² Π

Таблица П.17

Радиационная деактивация [38]

					<i>A</i> , 1/с	
1	N2+A	→	N2+X	<i>hν</i>	0.29900E+07	<i>A</i> ² Π _u
2	N2+B	→	N2+X	<i>hν</i>	0.17900E+09	<i>B</i> ² Σ _u ⁺
3	N2+C	→	N2+X	<i>hν</i>	0.24200E+09	<i>C</i> ² Σ _u ⁺

Благодарности и ссылки на гранты

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант №22-11-00062).

Литература

1. Olynick D.R., Henline W.D., Hartung L.C., Candler G.V. Comparison of Coupled Radiative Navier-Stokes Flow Solutions with the Project Fire-II Flight Data // AIAA Paper 94-1955, 1994, 15 p.
2. Johnston C.O., Hollis B.R., Sutton K. Nonequilibrium Stagnation-Line Radiative Heating for Fire-II // J. of Spacecraft and Rockets. 2008. Vol. 45. No.6. Pp.1185–1195.
3. Surzhikov S.T., Shang J.S. Numerical Rebuilding of Fire-II Flight Data with the Use of Different Physical-Chemical Kinetics and Radiation Models //AIAA Paper 2013-0190. 2013. 19 p.
4. Olynick D., Chen Y.-K., Tauber M.E. Aerothermodynamics of the Stardust Sample Return Capsule // J. of Spacecraft and Rockets. 1999. Vol.36. No.3. Pp. 442–462.
5. Liu Y., Prabhu D., Trumble K.A., Saunders D., Jenniskens P. Radiation Modelling for the Reentry of the Stardust Sample Return Capsule // J. of Spacecraft and Rockets. 2010. Vol.47. No.5. Pp.741–752.
6. Surzhikov S.T., Shang J.S. Coupled Radiation-Gasdynamics Model for Stardust Earth Entry Simulation // Journal of Spacecraft and Rockets. 2012. Vol. 49. No.5. Pp. 875–888.
7. Park C. Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics. Willey-Interscience Publication, J. Wiley & Sons. New-York, 1990.
8. Surzhikov S.T. Spectral Emissivity of Shock Waves in Martian and Titan Atmospheres // AIAA Paper 2010-4527. 32 p.

9. Keck C.K., Camm J.C., Kivel B. and Wentink T. Jr. Radiation from Hot Air Part II. Shock Tube Study of Absolute Intensities // *Annals of Physics*. 1959. Vol. 7. Pp. 1–38.
10. Thomas G.M. and Menard W.A. Experimental Measurements of Nonequilibrium and Equilibrium Radiation from Planetary Atmospheres // *AIAA Journal*. Vol. 4. No. 2. 1966. Pp. 227–237.
11. Залогин Г.Н., Козлов П.В., Кузнецова Л.А., Лосев С.А., Макаров В.Н., Романенко Ю.В., Суржиков С.Т. Излучение смеси CO₂-N₂-Ar в ударных волнах: эксперимент и теория // *ЖТФ*. 2001. Т. 46. № 6. С.10–16.
12. Surzhikov S.T., Sharikov I., Capitelli M., Colonna G. Kinetic Models of Non-Equilibrium Radiation of Strong Air Shock Waves // *AIAA Paper 2006-0586*. 2006. 11 p.
13. Авилова И.В., Биберман Л.М., Воробьев В.С. и др. Оптические свойства горячего воздуха. М.: Наука. 1970. 320 с.
14. Каменщиков В.А., Пластинин Ю.А., Николаев В.М. и др. Радиационные свойства газов при высоких температурах. М.: Машиностроение. 1971. 440 с.
15. Суржиков С.Т. Оптические свойства газов и плазмы. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э.Баумана. 2004. 575 с.
16. Cruden B.A., Prabhu D., Martinez R., Le H., Bose D., Grinstead J.H. Absolute Radiation Measurement in Venus and Mars Entry Conditions // *AIAA Paper 2010-4508*. 2010.
17. Brandis A.M., Johnston C.O., Cruden B.A., Prabhu D.K. and Bose D. Validation of High-Speed Earth Atmospheric Entry Radiative Heating from 9.5 to 15.5 km/s // *AIAA Paper 2012-2865*. 2012.
18. Brandis A.M., Cruden B.A., Prabhu D., Bose D., McGilvray M. and Morgan R.G. Analysis of Air Radiation Measurements Obtained in EAST and X2 Shocktube Facilities // *AIAA Paper 2010-4510*. 2010.
19. Дикалюк А.С., Суржиков С.Т. Расчетное исследование модели неравновесного излучения за фронтом ударных волн в марсианской атмосфере // *МЖГ*. 2013. № 1. С. 141–160.
20. Kozlov P.V., Surzhikov S.T. Nonequilibrium radiation NO in shocked air // *AIAA Paper 2017-0157*. <https://doi.org/10.2514/6.2017-0157>
21. Brandis A. M., Cruden B. A. Shock Tube Radiation Measurements in Nitrogen // *AIAA Paper 2018-3447*. 2018. 37 p. DOI: 10.2514/6.2018-3437
22. Cruden B.A., Brandis A.V., MacDonald M.E. Characterization of CO Thermochemistry in Incident Shockwave // *AIAA Paper 2018-3768*. 2018. 22 p. <https://doi.org/10.2514/6.2018-3768>
23. MacDonald M.E., Brandis A.V., Cruden B.A. Temperature and CO Number Density Measurements in Shocked CO and CO₂ via Tunable Diode Laser Absorption Spectroscopy // *AIAA Paper 2018-4067*. 2018. 23 p. DOI: 10.2514/6.2018-4067
24. Cruden B.A., Brandis A.M., Johnston C.O. Development of a Radiative Heating Margin Policy for Lunar Return Missions // *AIAA Paper 2017-1370*. 2017. <https://doi.org/10.2514/6.2017-1370>
25. Cruden B.A., Bogdanoff D.W. Shock Radiation Tests for Saturn and Uranus Entry Probes // *Journal of Spacecraft and Rockets*. 2017. Vol.54. No.6. Pp.1246-1257. <https://doi.org/10.2514/1.A33891>
26. Brandis A.M., Cruden B. A. Titan Atmospheric Entry Radiative Heating // *AIAA Paper 2017-4534*. 2017. 27 p. <https://doi.org/10.2514/6.2017-4534>
27. Brandis A.M., Cruden B. A. Benchmark Shock Tube Experiments of Radiative Heating Relevant to Earth Re-entry // *AIAA Paper 2017-1145*. 2017. <https://doi.org/10.2514/6.2017-1145>
28. Brandis A. M., Johnston C.O., Cruden B.A., Prabhu D.K. Equilibrium Radiative Heating from 9.5 to 15.5 km/s for Earth Atmospheric Entry // *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*. 2016. <https://doi.org/10.2514/1.T4878>
29. Brandis A. M., Cruden B. A., Olejniczak J., Grinstead J., Kirk L., Lillard L., Tanno H., Komuro T. Measurement of Ultraviolet Radiative Heating Augmentation in HIRST Reflected Shock Tunnel // *AIAA Paper 2015-2512*. 2015. 13 p. <https://doi.org/10.2514/6.2015-2512>
30. Cruden B.A., Brandis A.V. Measurement of radiative nonequilibrium for Air Shocks Between 7 and 9 km/s // *Journal Thermophysics and Heat Transfer*. November 2019. <https://doi.org/10.2514/1.T5735>

31. Козлов П. В. Экспериментальное исследование радиационных свойств воздуха за фронтом ударной волны при скоростях до 10 км/с // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2016. Т.17, вып. 1. <http://chemphys.edu.ru/issues/2016-17-1/articles/624/>
32. Козлов П. В., Романенко Ю. В. Исследование временных характеристик излучения ударно нагретого воздуха // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2014. Т. 15, вып. 2. <http://chemphys.edu.ru/issues/2014-15-2/articles/221/>
33. Суржигов С. Т. Введение в теорию eRC-моделей аэрофизики высоких скоростей. Общие понятия // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2021. Т. 22, вып. 6. <http://chemphys.edu.ru/issues/2021-22-6/articles/967/>
34. Суржигов С. Т. Введение в теорию eRC-моделей аэрофизики высоких скоростей. Электронная кинетика двухатомных молекул // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2021. Т. 22, вып. 6. <http://chemphys.edu.ru/issues/2021-22-6/articles/968/>
35. Суржигов С. Т. Применение квазистационарных eRC-моделей для расчета неравновесного излучения ударных волн при скорости порядка 10 км/с // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2022. Т.23, вып. 4. <http://chemphys.edu.ru/issues/2022-23-4/articles/1015/>
36. Pauli W. Probleme der modern Physik: Zun A. Sommerfeld 60 Geburtstage // Leipzig. Springer-Verlag, 1928, 30 p.
37. Хьюбер К.П., Герцберг Г. Константы двухатомных молекул. Т. 1, 2. М.: Мир. 1984.
38. Surzhikov S. T. Electronic Excitation in Air and Carbon Dioxide Gas. RTO-AVT-VKI Lecture Series 2008 “Non-Equilibrium Gas Dynamics, From Physical Models to Hypersonic Flights” September 8–12, 2008, 117 p.
39. Cartwright D.C. Rate Coefficients and Inelastic Momentum Transfer Cross Sections for Electronic Excitation of N₂ by Electrons // J. Appl. Phys. 1978. Vol. 49. No. 7. Pp. 3855–3862.
40. Gorelov V. A., Gladyshev M.K., Kireev A.Yu., Egorov I.V., Plastinin Yu.A., Karabadzhak G.F. Experimental and Numerical Study of Nonequilibrium Ultraviolet NO and N₂⁺ Emission in Shock Layer // JTHT. 1998. Vol. 12. No. 2. Pp. 172–179.
41. Teulet P., Sarrette J.P., Gomes A.M. Calculation of Electron Impact Inelastic Cross Sections and Rate Coefficients for Diatomic Molecules. Application to Air Molecules // JQSRT. 1999. Vol. 62. Pp. 549–569.
42. Park Ch. Rate Parameters for Electronic Excitation of Diatomic Molecules II. Heavy Particle-Impact Processes // AIAA Paper 2008-1446. 15 p.
43. Gross R. W. F., Cohen N. Temperature Dependence of Chemiluminiscent Reactions II. Nitric Oxide Afterglow // Journal of Chemical Physics. 1968. Vol.48. No. 6. Pp. 2582–2590.
44. Chen Y.-K., Milos F.S. Ablation and Thermal Response Program for Spacecraft Heatshield Analysis // J. of Spacecraft and Rockets. 1999. Vol. 36. No. 3. Pp. 475–483.
45. Smith G. P., Glosley D. R., Eckstrom D. J. Mechanism and Rate Constants for the Chemistry of Radiating, Shock-Heated Air // SRI Project. 6277. MP89-037. 1989.

References

1. Olynick D.R., Henline W.D., Hartung L.C., Candler G.V., Comparison of Coupled Radiative Navier-Stokes Flow Solutions with the Project Fire-II Flight Data, AIAA Paper 94-1955, 1994, 15 p.
2. Johnston C.O., Hollis B.R., Sutton K., Nonequilibrium Stagnation-Line Radiative Heating for Fire-II, *J. of Spacecraft and Rockets*, 2008, vol. 45, no.6, pp.1185–1195.
3. Surzhikov S.T., Shang J.S., Numerical Rebuilding of Fire-II Flight Data with the Use of Different Physical-Chemical Kinetics and Radiation Models, AIAA Paper 2013-0190, 2013, 19 p.
4. Olynick D., Chen Y.-K., Tauber M.E., Aerothermodynamics of the Stardust Sample Return Capsule, *J. of Spacecraft and Rockets*, 1999, vol. 36, no. 3, pp. 442–462.

5. Liu Y., Prabhu D., Trumble K. A., Saunders D., Jenniskens P., Radiation Modelling for the Reentry of the Stardust Sample Return Capsule, *J. of Spacecraft and Rockets*, 2010, vol. 47, no. 5, pp. 741–752.
6. Surzhikov S. T., Shang J. S., Coupled Radiation-Gasdynamic Model for Stardust Earth Entry Simulation, *Journal of Spacecraft and Rockets*, 2012, vol. 49, no. 5, pp. 875–888.
7. Park C., *Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics*, Willey-Interscience Publication, Wiley & Sons. New-York, 1990, 358 p.
8. Surzhikov S. T., Spectral Emissivity of Shock Waves in Martian and Titan Atmospheres, AIAA Paper 2010-4527. <https://doi.org/10.2514/6.2010-4527>
9. Keck C. K., Camm J. C., Kivel B., and Wentink T. Jr., Radiation from Hot Air Part II. Shock Tube Study of Absolute Intensities, *Annals of Physics*, 1959, vol. 7, issue 1. DOI: 10.1016/0003-4916(59)90045-4
10. Thomas G. M., and Menard W. A., Experimental Measurements of Nonequilibrium and Equilibrium Radiation from Planetary Atmospheres, *AIAA Journal*, 1966, vol. 4, no. 2. pp. 227–237. <https://doi.org/10.2514/3.3423>
11. Zalogin G. N., Kozlov P. V., Kuznetsova L. A., Losev S. A., Makarov V. N., Romanenko Yu. V., Surzhikov S. T., Radiation of a CO₂-N₂-Ar mixture in shock waves: experiment and theory, *J. Tech. Phys.*, 2001, vol. 46, no. 6, pp.10–16 [in Russian].
12. Surzhikov S. T., Sharikov I., Capitelli M., Colonna G., Kinetic Models of Non-Equilibrium Radiation of Strong Air Shock Waves, AIAA Paper 2006-0586. 2006. 11 p.
13. Avilova I. V., Biberman L. M., Vorobyov V. S., et al., *Optical properties of hot air*, M.: Nauka. 1970. 320 p. [in Russian].
14. Kamenshchikov V. A., Plastinin Yu. A., Nikolaev V. M., et al., *Radiation properties of gases at high temperatures*, M.: Mechanical Engineering. 1971. 440 p. [in Russian].
15. Surzhikov S. T., *Optical properties of gases and plasma*, M.: Publishing house of Bauman Moscow State Technical University. 2004. 575 p. [in Russian].
16. Cruden B. A., Prabhu D., Martinez R., Le H., Bose D., Grinstead J. H., Absolute Radiation Measurement in Venus and Mars Entry Conditions, AIAA Paper 2010-4508. 2010.
17. Brandis A. M., Johnston C. O., Cruden B. A., Prabhu D. K., and Bose D., Validation of High-Speed Earth Atmospheric Entry Radiative Heating from 9.5 to 15.5 km/s, AIAA Paper 2012-2865. 2012.
18. Brandis A. M., Cruden B. A., Prabhu D., Bose D., McGilvray M., and Morgan R. G., Analysis of Air Radiation Measurements Obtained in EAST and X2 Shocktube Facilities, AIAA Paper 2010-4510. 2010.
19. Dikalyuk A. S., Surzhikov S. T., Computational study of the model of nonequilibrium radiation behind the shock wave front in the Martian atmosphere, *MZhG*, 2013, no. 1, pp. 141–160. [in Russian]
20. Kozlov P. V., Surzhikov S. T., Nonequilibrium radiation NO in shocked air, AIAA Paper 2017-0157. 16 p. <https://doi.org/10.2514/6.2017-0157>
21. Brandis A. M., Cruden B. A., Shock Tube Radiation Measurements in Nitrogen, AIAA Paper 2018-3447. 2018. DOI: 10.2514/6.2018-3437
22. Cruden B. A., Brandis A. V., MacDonald M. E., Characterization of CO Thermochemistry in Incident Shockwave, AIAA Paper 2018-3768. 2018. 22 p. <https://doi.org/10.2514/6.2018-3768>
23. MacDonald M. E., Brandis A. V., Cruden B. A., Temperature and CO Number Density Measurements in Shocked CO and CO₂ via Tunable Diode Laser Absorption Spectroscopy, AIAA Paper 2018-4067. 2018. 23 p. DOI: 10.2514/6.2018-4067
24. Cruden B. A., Brandis A. M., Johnston C. O., Development of a Radiative Heating Margin Policy for Lunar Return Missions, AIAA Paper 2017-1370. 2017. <https://doi.org/10.2514/6.2017-1370>
25. Cruden B. A., Bogdanoff D. W., Shock Radiation Tests for Saturn and Uranus Entry Probes, *Journal of Spacecraft and Rockets*, 2017, vol. 54, no. 6, pp.1246–1257. <https://doi.org/10.2514/1.A33891>
26. Brandis A. M., Cruden B. A., Titan Atmospheric Entry Radiative Heating, AIAA Paper 2017-4534. 2017, 27 p. <https://doi.org/10.2514/6.2017-4534>

27. Brandis A. M., Cruden B. A., Benchmark Shock Tube Experiments of Radiative Heating Relevant to Earth Re-entry, AIAA Paper 2017-1145, 2017, 50 p. <https://doi.org/10.2514/6.2017-1145>
28. Brandis A. M., Johnston C. O., Cruden B. A., Prabhu D. K., Equilibrium Radiative Heating from 9.5 to 15.5 km/s for Earth Atmospheric Entry, *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 2016. <https://doi.org/10.2514/1.T4878>
29. Brandis A. M., Cruden B. A., Olejniczak J., Grinstead J., Kirk L., Lillard L., Tanno H., Komuro T., Measurement of Ultraviolet Radiative Heating Augmentation in Hiest Reflected Shock Tunnel, AIAA Paper 2015-2512, 2015, 13 p. <https://doi.org/10.2514/6.2015-2512>
30. Cruden B. A., Brandis A. V., Measurement of radiative nonequilibrium for Air Shocks Between 7 and 9 km/s, *Journal Thermophysics and Heat Transfer*, November 2019. <https://doi.org/10.2514/1.T5735>
31. Kozlov P. V., Experimental Investigation of Air Radiation up to 10 km/s, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2016, vol. 17, issue 1 [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2016-17-1/articles/624/>
32. Kozlov P. V., Romanenko Yu. V., Study time characteristics emission of shock heated air, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2014, vol. 15, issue 2 [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2014-15-2/articles/221/>
33. Surzhikov S. T., Introduction to the Theory of the eRC-Models of High-Speed Aerophysics. The General Concepts, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2021, vol. 22, issue 6 [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2021-22-6/articles/967/>
34. Surzhikov S. T., Introduction to the theory of eRC-models of high-speed aerophysics. Electronic kinetics of diatomic molecules, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2021, vol. 22, issue 6 [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2021-22-6/articles/968/>
35. Surzhikov S. T., Application of Quasi-Stationary eRC Models for the Calculation of Non-Equilibrium Radiation of Shock Waves at Velocity about 10 km/s, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2022, vol. 23, issue 4 [in Russian]. <http://chemphys.edu.ru/issues/2022-23-4/articles/1015/>
36. Pauli W., *Probleme der modern Physik: Zun A. Sommerfeld 60 Geburtstage*, Leipzig. Springer-Verlag, 1928, 30 p.
37. Huber K. P., Herzberg G., *Molecular Spectra and Molecular Structure*, Springer Science+Business Media New York. 1984. 689 p.
38. Surzhikov S. T., Electronic Excitation in Air and Carbon Dioxide Gas, RTO-AVT-VKI Lecture Series 2008 “Non-Equilibrium Gas Dynamics, From Physical Models to Hypersonic Flights”, 2008, 117 p.
39. Cartwright D. C., Rate Coefficients and Inelastic Momentum Transfer Cross-Sections for Electronic Excitation of N₂ by Electrons, *J. Appl. Phys.*, 1978, vol. 49, no. 7, pp. 3855–3862.
40. Gorelov V. A., Gladyshev M. K., Kireev A. Yu., Egorov I. V., Plastinin Yu. A., Karabadzha G. F., Experimental and Numerical Study of Nonequilibrium Ultraviolet NO and N₂⁺ Emission in Shock Layer, *JTHT*, 1998, vol. 12, no. 2. pp. 172–179.
41. Teulet P., Sarrette J. P., Gomes A. M., Calculation of Electron Impact Inelastic Cross Sections and Rate Coefficients for Diatomic Molecules. Application to Air Molecules, *JQSRT*, 1999, vol. 62, pp. 549–569. DOI: 10.1016/S0022-4073(98)00129-0
42. Park Ch., Rate Parameters for Electronic Excitation of Diatomic Molecules II. Heavy Particle-Impact Processes, AIAA Paper 2008-1446, 15 p.
43. Gross R. W. F., Cohen N., Temperature Dependence of Chemiluminescent Reactions II. Nitric Oxide Afterglow, *Journal of Chemical Physics*, 1968, vol. 48, no. 6, pp. 2582–2590. <https://doi.org/10.1063/1.1669486>
44. Chen Y.-K., Milos F. S., Ablation and Thermal Response Program for Spacecraft Heatshield Analysis, *J. of Spacecraft and Rockets*, 1999, vol. 36, no. 3, pp.475–483. <https://doi.org/10.2514/2.3469>
45. Smith G. P., Glosley D. R., Eckstrom D. J., Mechanism and Rate Constants for the Chemistry of Radiating, Shock-Heated Air, SRI Project, 6277. MP89-037. 1989.

Статья поступила в редакцию 27 ноября 2024 г.