

УДК 533.6.011

ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ НЕРАВНОВЕСНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ УДАРНОЙ ВОЛНЫ В ВОЗДУХЕ В ОБЛАСТИ ВАКУУМНОГО УЛЬТРАФИОЛЕТОВОГО СПЕКТРА

В. А. Горелов, А. Ю. Киреев

Центральный аэрогидродинамический институт им. Н. Е. Жуковского,
140180 Жуковский, Россия
E-mails: va_gorelov@mail.ru, a_kireev1950@mail.ru

Разработана физико-химическая модель генерирования неравновесного молекулярного излучения в области вакуумного ультрафиолетового (ВУФ) спектра за ударной волной в воздухе в диапазоне значений ее скорости $4,5 \div 9,5$ км/с. С использованием результатов экспериментов в ударной трубе по исследованию фотоионизации воздуха перед фронтом ударной волны верифицирована численная модель ВУФ-излучения в диапазоне длин волн $85 \div 105$ нм. В модельных расчетах установлено, что неравновесное ВУФ-излучение возникает в очень тонком высокотемпературном слое за фронтом ударной волны и на него оказывает влияние наличие электронов.

Ключевые слова: ударная волна, неравновесность, физико-химические модели, ионизирующее излучение.

DOI: 10.15372/PMTF20160117

Введение. В последнее десятилетие при проведении аэрокосмических исследований большое внимание уделяется изучению особенностей лучистых тепловых потоков, направленных к поверхности космических аппаратов (КА), в условиях высокоскоростного входа в атмосферу Земли. Это обусловлено разработкой аэрокосмических проектов, предусматривающих возвращение КА или их элементов на Землю. При скорости входа в атмосферу более 7 км/с излучение ударного слоя вблизи КА необходимо учитывать в суммарном балансе теплового потока к его поверхности. Наименее изученной составляющей лучистого теплового потока является излучение в области вакуумного ультрафиолетового (ВУФ) спектра с длиной волны менее 200 нм. Эта длина волны соответствует коротковолновой границе пропускания кварца. Экспериментальное исследование ВУФ-излучения существенно затруднено, поскольку вследствие его поглощения в воздухе необходимо использовать спектральную аппаратуру с вакуумной откачкой всего внутреннего объема спектрометра и всего тракта вывода излучения и его транспортировки от исследуемого объема высокотемпературного газа до устройства регистрации. В настоящее время количественные данные о ВУФ-излучении воздуха за ударной волной ограничены результатами отдельных измерений при $\lambda \geq 120$ нм [1]. Однако результаты численного моделирования и летных экспериментов показывают, что вклад ВУФ-излучения в лучистый тепловой поток может быть значительным [2].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 14-08-00976-а).

© Горелов В. А., Киреев А. Ю., 2016

В данной работе предлагается физико-химическая модель формирования неравновесного ВУФ-излучения прямой ударной волны в воздухе в диапазоне ее скоростей $V = 4,5 \div 9,5$ км/с и диапазоне излучения $85 \div 105$ нм. Спектральный диапазон выбран в соответствии с методикой экспериментальной верификации численной модели с использованием результатов экспериментов по исследованию фотоионизации воздуха перед фронтом ударной волны. Предполагается, что в рассматриваемых условиях основной вклад в ВУФ-излучение воздуха вносит излучение молекул азота в системах полос Берджа — Хопфилда. Некоторые результаты данной работы приведены в [3, 4].

Спектральная модель неравновесного излучения. В настоящей работе используется модель оптически тонкой среды с приближенной спектральной моделью, в которой проводится осреднение по вращательной структуре электронного спектра рассматриваемых переходов молекулы N_2 . Интенсивность излучения молекулярных полос вычисляется по упрощенной формуле [5]

$$I_\lambda = 3,22 \cdot 10^{-10} d \lambda^{-6} \frac{n_{el,v'}}{Q_{el,v'}} \sum_{v'} \sum_{v''} S_{v'v''} \frac{1}{|\Delta B_{v'}|} \exp\left(-\frac{hcE_{v'}}{k_B T_{v'}}\right) \times \\ \times \exp\left(-\frac{hcB_{v'}}{k_B T_r \Delta B_{v''}} (\omega - \omega_{v'v''} + B_{v'v''})\right),$$

где I_λ — интенсивность излучения, Вт/(см³·ср·мкм); h — постоянная Планка; k_B — постоянная Больцмана; c — скорость света; $n_{el,v}$ — заселенность (концентрация молекул) верхнего электронно-колебательного состояния молекулы N_2 , см⁻³; $T_{v'}$ — колебательная температура, К; $T_r = T$ — вращательная температура, К; ω — волновое число, см⁻¹; $\omega_{v'v''}$ — волновое число электронно-колебательного перехода, см⁻¹; $E_{v'}$ — характеристическая колебательная энергия, см⁻¹; $S_{v'v''}$ — сила, возникающая при электронно-колебательном переходе и связанная с коэффициентом Эйнштейна $A_{v'v''}$ соотношением

$$S_{v'v''} = \frac{(2S+1)g_{\Lambda'}}{2,026 \cdot 10^{-6} \omega_{v'v''}^3} A_{v'v''},$$

d — множитель, зависящий от модели расчета $Q_{el,v}$ (в приближении модели жесткий ротатор — гармонический осциллятор $d = 1/\sigma$); σ — число симметрии ($\sigma = 1$ для гетероядерных молекул и $\sigma = 2$ для гомоядерных молекул); $2S+1$ — мультиплетность электронного состояния; $Q_{el,v'}$ — колебательно-вращательная статистическая сумма; B_v — вращательная постоянная; $\Delta B_{v'v''} = B_{v'} - B_{v''}$; $g_{\Lambda'} = 2 - \delta_{0,\Lambda'}$; Λ — квантовое число, соответствующее собственному значению оператора проекции орбитального момента электронов на межъядерную ось; δ — символ Кронекера ($\delta_{0,\Lambda} = 1$ при $\Lambda = 0$; $\delta_{0,\Lambda} = 0$ при $\Lambda \neq 0$).

В расчетах использовались данные о спектроскопических характеристиках молекул и значения коэффициента Эйнштейна $A_{v'v''}$ для переходов, рекомендованные в [6]. Для определения интенсивности излучения в молекулярных системах полос необходимо иметь информацию о заселенности верхнего электронного состояния в молекулярных переходах систем полос Берджа — Хопфилда: ВН1 ($b^1\Pi_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$) и ВН2 ($b^1\Sigma_u \rightarrow X^1\Sigma_g^+$), поступательной и колебательных температурах в высокотемпературном ударном слое. Предполагается, что распределение колебательных уровней возбужденного электронного состояния молекулы N_2 является больцмановским с температурой T_{VN_2} в основном электронном состоянии.

Газодинамическая структура релаксационной зоны за фронтом ударной волны описывается в соответствии с уравнениями Эйлера, дополненными термическим уравнением состояния многокомпонентного химически реагирующего газа:

$$\rho V = \rho_\infty V_\infty, \quad p + \rho V^2 = p_\infty + \rho_\infty V_\infty^2, \quad H + \frac{V^2}{2} = H_\infty + \frac{V_\infty^2}{2}, \quad p = \frac{\rho RT}{\mu}. \quad (1)$$

Таблица 1

Схемы реакций и константы A , B , C скоростей прямых реакций формирования электронно-возбужденных состояний молекулы азота

Схема реакции	A , см ³ /с	B	C , К
$N_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightleftharpoons N_2(b^1\Pi_u) + e$	$3,9 \cdot 10^{-13}$	0,87	145 125
$N_2(X^1\Sigma_g^+) + M \rightleftharpoons N_2(b^1\Pi_u) + M$	$4,1 \cdot 10^{-8}$	-0,50	145 125
$N_2(X^1\Sigma_g^+) + e \rightleftharpoons N_2(b^1\Sigma_u) + e$	$5,2 \cdot 10^{-13}$	0,85	149 250
$N_2(X^1\Sigma_g^+) + M \rightleftharpoons N_2(b^1\Sigma_u) + M$	$4,3 \cdot 10^{-8}$	-0,50	149 250

Здесь p , ρ , V , T , H — давление, плотность, скорость, температура и энтальпия воздуха в релаксационной зоне; R — универсальная газовая постоянная; μ — молярная масса газовой смеси; индекс “ ∞ ” соответствует набегающему потоку.

В данной работе для определения концентраций электронно-возбужденных молекул разработана схема реакций заселения (распада) электронных состояний азота, учитывающая неупругие столкновения с электронами, атомами и молекулами (табл. 1) и радиационное обеднение уровней. Расчет заселенностей возбужденных состояний молекул азота $N_2(b^1\Pi_u)$ и $N_2(b^1\Sigma_u)$ проводился с использованием балансных уравнений

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

где индекс $i = 1, 2$ соответствует переходам ВН1 и ВН2; W_{1i} — скорость заселения в ходе соударений с атомами и молекулами:

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

W_{2i} — скорость заселения в ходе соударений со свободными электронами:

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

τ_i — время свечения молекулы в возбужденном состоянии; n_M — концентрация нейтральных частиц; N_e — концентрация электронов.

Константы скоростей $k_f = AT^B \exp(-C/T)$ получены с использованием подхода, предложенного в работах [7–9], и результатов экспериментальных исследований фотоионизации воздуха для реакций, представленных в табл. 1. Константы скоростей реакций с участием электронов зависят от температуры электронов T_e .

Константы скоростей обратных реакций k_r определялись с использованием констант равновесия для рассматриваемых переходов. Радиационный распад электронно-колебательного возбужденного состояния учитывается с использованием данных о коэффициентах Эйнштейна [6].

Помимо подхода, в котором использовалось балансное уравнение, рассматривались приближенные модели, в частности широко применяемая в США квазистационарная модель (QSS-модель), для которой $dn_i/dt = 0$ в уравнении (2). При проведении сравнительного анализа использовалась также равновесная больцмановская модель заселения возбужденных состояний в зависимости от поступательной температуры газа T .

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

Кинетическая модель неравновесных процессов. Численное моделирование неравновесных процессов за ударной волной основано на использовании физико-химической модели высокотемпературного воздуха. При рассматриваемых скоростях газ за ударной волной моделируется следующими компонентами: N_2 , O_2 , NO , N , O , NO^+ , N_2^+ ,

O_2^+ , O^+ , N^+ , e . Для моделирования неравновесного излучения в системах полос молекул химические процессы в смеси дополнены кинетикой образования возбужденных электронно-колебательных состояний молекул (см. табл. 1). При этом используется модель колебательной релаксации, в которой колебательные температуры молекул T_{v,N_2} , T_{v,O_2} , $T_{v,NO}$, температура электронов T_e и поступательная температура T различаются. Предполагалось, что вращательные степени свободы молекул находятся в равновесии с поступательными степенями.

Возбуждение колебательных степеней свободы молекул. Моделирование взаимодействия колебательных и поступательных степеней свободы осуществлялось на основе уравнения Ландау — Теллера

$$\frac{de_m}{dt} = \frac{e_m^0 - e_m}{\tau_m}, \quad (3)$$

где $e_m = [\exp(\theta_m/T_{V,m}) - 1]^{-1}$ — энергия колебательной моды молекулы вида m при температуре $T_{V,m}$; θ_m — характеристическая колебательная температура молекулы вида m ; e_m^0 — энергия колебательной моды молекулы при температуре $T_{V,m} = T$; τ_m — время релаксации ($V-T$)-обмена, которое можно оценить с использованием соотношения

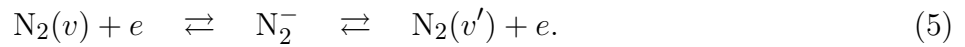
$$\tau_m = \tau_{MW,m} + [n\sqrt{8k_B T/(\pi m)}\sigma_{V,m}]^{-1}, \quad (4)$$

$\tau_{MW,m}$ — время колебательной релаксации, определяемое с помощью аппроксимации Милликена — Уайта:

$$p\tau_{MW,m} = \exp[A_{MW,m}(T^{-1/3} - B_{MW,m}) - 18,42],$$

$$A_{MW,m} = 1,16 \cdot 10^{-3} \mu_{\pi}^{1/2} \theta_m^{4/3}, \quad B_{MW,m} = 0,015 \mu_{\pi}^{1/4},$$

μ_{π} — приведенная масса частиц, участвующих в реакции ($V-T$)-обмена; n — плотность газа в зоне релаксации; второе слагаемое в (4) — поправка Парка, корректирующая время релаксации при высоких температурах; $\sigma_{V,m} = \sigma'_{V,m}(50\,000/T)^2$. Зависимость $\sigma_{V,m}$ от температуры и параметр $\sigma'_{V,m} = 3 \cdot 10^{-17} \text{ см}^2$ определяются таким образом, чтобы аппроксимация (4) удовлетворительно описывала экспериментальные данные. Учитывались обмен энергии между колебательными степенями свободы молекул и изменение колебательной энергии молекул в химических реакциях. Возбуждение колебательных уровней N_2 электронными столкновениями определяется резонансной реакцией



Влияние этого процесса на колебательную релаксацию молекулы N_2 несущественно, однако он играет важную роль в энергетическом балансе электронного газа.

Процессы диссоциации и химические реакции. В рассматриваемом температурном диапазоне диссоциация молекул N_2 , O_2 и NO за ударной волной происходит одновременно с их колебательным возбуждением. Этот факт обуславливает сильное взаимодействие и взаимовлияние колебательной релаксации молекул и их диссоциации — колебательно-диссоциационное взаимодействие (КДВ). Влияние неравновесного возбуждения колебательных степеней свободы молекул на диссоциацию учитывается в зависимости константы скорости диссоциации от температур T , T_v . При численном моделировании процесса неравновесного УФ-излучения использовались две модели КДВ: полуэмпирическая модель Парка, в которой константа скорости неравновесной диссоциации зависит от эффективной температуры $T_{eff} = T_v^{0,5} T^{0,5}$, и широко используемая модель CVDV [10] с параметром $U = D/6$ (D — энергия диссоциации рассматриваемой двухатомной молекулы). Схемы реакций диссоциации, обменных реакций и используемые в модели константы скоростей приведены в табл. 2 (M — сорт частиц). Зависимость констант скоростей прямых реакций от температуры удовлетворяет закону Аррениуса $k_f = AT^n e^{-E/T}$. В модели

Таблица 2

Схемы реакций диссоциации, обменных реакций и константы скоростей прямых реакций k_f

Схема реакции	M	$k_f, \text{см}^3/(\text{моль} \cdot \text{с})$
$\text{N}_2(v) + M \rightleftharpoons \text{N} + \text{N} + M$	N_2	$4,9 \cdot 10^{17} T^{-0,5} \exp(-113\,200/T)$
	N	$7,4 \cdot 10^{18} T^{-0,5} \exp(-113\,200/T)$
	$\text{O}, \text{O}_2, \text{NO}$	$1,8 \cdot 10^{17} T^{-0,5} \exp(-113\,200/T)$
	e	$8,1 \cdot 10^{19} T_e^{-1,28} \exp(-113\,200/T_e)$
$\text{O}_2(v) + M \rightleftharpoons \text{O} + \text{O} + M$	O_2	$3,25 \cdot 10^{19} T^{-1} \exp(-59\,380/T)$
	O	$8,1 \cdot 10^{19} T^{-1} \exp(-59\,380/T)$
	$\text{N}, \text{N}_2, \text{NO}$	$6,15 \cdot 10^{18} T^{-1} \exp(-59\,380/T)$
	e	$10^{-25} T_e^{7,9} \exp(-70\,760/T_e)$
$\text{NO}(v) + M \rightleftharpoons \text{N} + \text{O} + M$	$\text{N}_2, \text{O}_2, \text{N}, \text{O}, \text{NO}$	$4 \cdot 10^{20} T^{-1,5} \exp(-75\,400/T)$
	e	$4,68 \cdot 10^9 T_e^{1,34} \exp(-78\,530/T_e)$
$\text{N}_2(v) + \text{O} \rightleftharpoons \text{NO} + \text{N}$	—	Аппроксимация из [11]
$\text{O}_2 + \text{N} \rightleftharpoons \text{NO} + \text{O}$	—	$6,4 \cdot 10^9 T \exp(-3150/T)$

Таблица 3

Схемы реакций ионизации и константы скоростей прямых (k_f) и обратных (k_r) реакций

№ п/п	Схема реакции	$k_f, \text{см}^3/(\text{моль} \cdot \text{с})$	$k_r, \text{см}^3/(\text{моль} \cdot \text{с})$
1	$\text{N} + \text{O} \rightleftharpoons \text{NO}^+ + e$	—	$2,6 \cdot 10^{19} T_e^{-1}$
2	$\text{N} + \text{N} \rightleftharpoons \text{N}_2^+ + e$	—	$5 \cdot 10^{18} T_e^{-1/2}$
3	$\text{O} + \text{O} \rightleftharpoons \text{O}_2^+ + e$	—	$5 \cdot 10^{19} T_e^{-1}$
4	$\text{NO} + e \rightleftharpoons \text{NO}^+ + e + e$	$6,5 \cdot 10^{23} T_e^{-1,7} \exp(-107\,370/T_e)$	—
5	$\text{N}_2 + e \rightleftharpoons \text{N}_2^+ + e + e$	$4,5 \cdot 10^{-7} T_e^5 \exp(-118\,840/T_e)$	—
6	$\text{O}_2 + e \rightleftharpoons \text{O}_2^+ + e + e$	$10^{-13} T_e^6 \exp(-140\,150/T_e)$	—
7	$\text{O} + e \rightleftharpoons \text{O}^+ + e + e$	$5,2 \cdot 10^{12} T_e^{0,67} \exp(-157\,980/T_e)$	—
8	$\text{N} + e \rightleftharpoons \text{N}^+ + e + e$	$1,8 \cdot 10^{13} T_e^{0,6} \exp(-168\,770/T_e)$	—

Парка для реакций диссоциации $T = T_{eff}$ константы скорости реакций с участием электронов зависят от электронной температуры.

Процессы ионизации. Процессы ионизации (табл. 3) и реакции обмена зарядом (табл. 4) оказывают существенное влияние на ВУФ-излучение. Принималось, что электроны в ударном слое формируются в трех реакциях ассоциативной ионизации (см. табл. 3, реакции 1–3) и реакциях ионизации электронным ударом (см. табл. 3, реакции 4–8).

Электронная температура. В рассматриваемом диапазоне скоростей ударной волны температура свободных электронов T_e оказывает влияние на заселенность рассматриваемых возбужденных состояний молекул N_2 . Величина T_e определялась из уравнения баланса электронной энергии

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{3}{2} T_e n_e \right) = U_{a.i} - U_{el} - U_{e-R} - U_{e-v} - U_{e-d} - U_{e-i}. \quad (6)$$

В уравнении (6) учтены следующие процессы обмена энергии электронами:

1) появление электронов с энергией $E \approx k_B T$ в реакциях ассоциативной ионизации и потеря энергии при рекомбинации ионов и электрона [12]:

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

(R_{fj}, R_{rj} — скорости прямых и обратных реакций ассоциативной ионизации j соответственно);

Таблица 4

Схемы реакций обмена зарядом и константы скоростей прямых реакций k_f

Схема реакции	k_f , см ³ /(моль · с)
$N_2 + O_2 \rightleftharpoons O_2^+ + N_2^+$	$9,9 \cdot 10^{12} \exp(-40\,700/T)$
$NO^+ + N_2 \rightleftharpoons NO + N_2^+$	$3,8 \cdot 10^{15} \exp(-73\,230/T)$
$O_2^+ + N \rightleftharpoons O_2 + N^+$	$8,7 \cdot 10^{13} T^{0,14} \exp(-28\,600/T)$
$O_2 + O^+ \rightleftharpoons O_2^+ + O$	$6,45 \cdot 10^{14} T^{0,7}$
$O^+ + N_2 \rightleftharpoons O + N_2^+$	$9 \cdot 10^{11} T^{0,36} \exp(-22\,800/T)$
$NO^+ + O \rightleftharpoons NO + O^+$	$1,82 \cdot 10^{13} \exp(-50\,130/T)$
$NO^+ + O_2 \rightleftharpoons NO + O_2^+$	$2,4 \cdot 10^{13} \exp(-32\,600/T)$
$N_2^+ + O \rightleftharpoons NO + N^+$	$1,8 \cdot 10^{14} \exp(-25\,760/T)$
$N_2 + O^+ \rightleftharpoons NO + N^+$	$2,2 \cdot 10^{14}/T$
$NO^+ + N \rightleftharpoons O + N_2^+$	$7,2 \cdot 10^{13} \exp(-35\,500/T)$
$NO^+ + O \rightleftharpoons O_2 + N^+$	$10^{12} T^{0,5} \exp(-77\,200/T)$
$NO + O^+ \rightleftharpoons O_2 + N^+$	$1,4 \cdot 10^5 T^{1,9} \exp(-15\,300/T)$

2) обмен энергией при упругих столкновениях электронов с другими электронами и тяжелыми частицами [13]:

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

(ν_{ei} — частота столкновений; m_e , m_i — массы электрона и тяжелой частицы сорта i);

3) передача энергии электрона вращательным степеням свободы молекул [13]:

$$U_{e-R} = \sum_{j=1}^3 \frac{64}{\sqrt{3}} B_j \left(\frac{8k_B T_e}{\pi m_e} \right)^{0,5} \sigma_R \left(\frac{T}{T_e} - 1 \right) n_j n_e$$

($\sigma_R = 2\pi s_j^2 / (15ea_0^2)$ — сечение столкновения; s_j — квадрупольный момент молекулы; B_j — вращательная постоянная молекулы сорта j (N_2 , O_2 , NO));

4) возбуждение колебательных уровней молекулы N_2 в реакции (5) [14]:

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

(q — колебательная статистическая сумма молекулы N_2 ; $k_{vv'}(T_e)$ ($v = 0 \div 8$, $v < v'$) — константы скорости прямой реакции (5) для переходов;

5) потеря энергии электрона при диссоциации молекул U_{e-d} и ионизации атомов и молекул U_{e-i} в реакциях с его участием.

Система уравнений (1)–(3), (6) решалась численно совместно с дифференциальными уравнениями (см., например, [7]), моделирующими состав воздуха в ударном слое.

Верификация модели на основе экспериментов в электроразрядной ударной трубе. Вследствие сложности спектральных измерений интенсивности ВУФ-излучения ударной волны для верификации представленной модели разработана экспериментальная методика определения интенсивности ВУФ-излучения ударной волны по степени фотоионизации воздуха перед ее фронтом. Эксперименты проведены в электроразрядной ударной

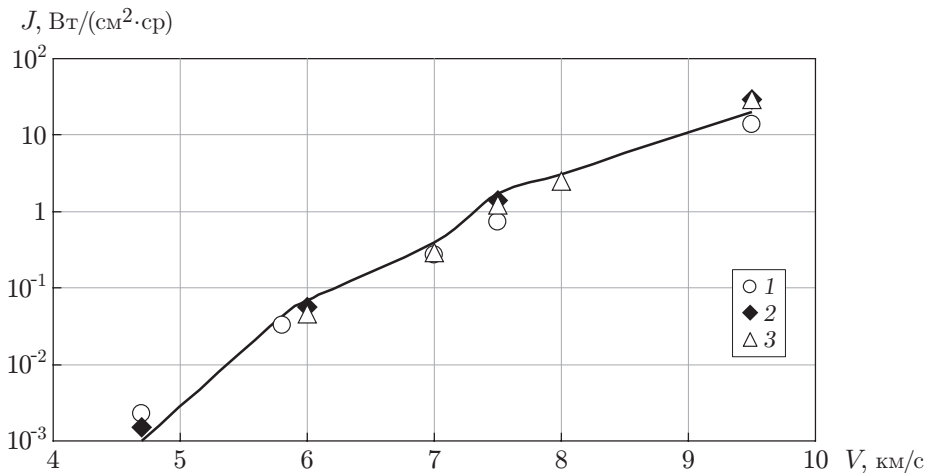


Рис. 1. Зависимость интенсивности ВУФ-излучения ударной волны от скорости ее движения в воздухе при начальном давлении, равном 66,661 Па: линия — результаты расчета, точки — результаты измерений степени фотоионизации на различных расстояниях от фронта ударной волны (1 — $x = 1$ см, 2 — $x = 10$ см, 3 — $x = 20$ см)

трубе Центрального аэрогидродинамического института им. Н. Е. Жуковского при скоростях ударной волны $4,6 \div 14,0$ км/с [15]. Установлено, что перед ударной волной происходит фотоионизация молекул O_2 в диапазоне длин волн $\lambda = 85 \div 105$ нм, при этом осредненная площадь сечения фотоионизации равна $3 \cdot 10^{-18}$ см². При концентрации электронов в зоне фотоионизации $N_e \leq 10^{12}$ см⁻³ процессами рекомбинации и прилипания электронов перед ударной волной можно пренебречь [16]. Для диапазона скоростей ударной волны $4,6 \div 9,5$ км/с была решена обратная задача, в которой по результатам измерения концентрации электронов перед ударной волной на расстояниях от нее $x = 1, 10, 20$ см определена интенсивность фотоионизирующего ВУФ-излучения ударной волны [3]. Для этого использовалось соотношение, полученное в [16] для диапазона длин волн фотоионизации молекулы кислорода

$$N_e(x) \approx \frac{2\pi J}{VI} [E_3(kx) - E_3(k\sqrt{x^2 + R_T^2})].$$

Здесь $J = \int_{\lambda_0}^{\lambda_1} J_\lambda d\lambda$ — поток ВУФ-излучения ударного слоя; $\lambda_0 = 105$ нм; $\lambda_1 = 85$ нм; E_3 —

интегроэкспоненциальная функция третьего рода; I — “цена” электрона фотоионизации (экспериментально определяемая энергия кванта, необходимая для ионизации вещества (воздуха)); x — расстояние перед ударной волной; R_T — радиус канала трубы; k — осредненный коэффициент поглощения в области фотоионизации O_2 .

На рис. 1 приведена зависимость интенсивности ВУФ-излучения J ударной волны от ее скорости. Кривая $J(V)$ получена в результате расчета по представленной выше численной модели с использованием КДВ-модели Парка. В диапазоне скоростей $4,7 \div 6,0$ км/с различие результатов эксперимента и расчета составляет приблизительно 45 %, в диапазоне $7,0 \div 9,5$ км/с — приблизительно 30 %.

Результаты численного моделирования неравновесного ВУФ-излучения ударной волны. На рис. 2 представлены результаты расчетов интенсивности ВУФ-излучения в диапазоне длин волн $85 \div 105$ нм за ударной волной. Видно, что интенсивное

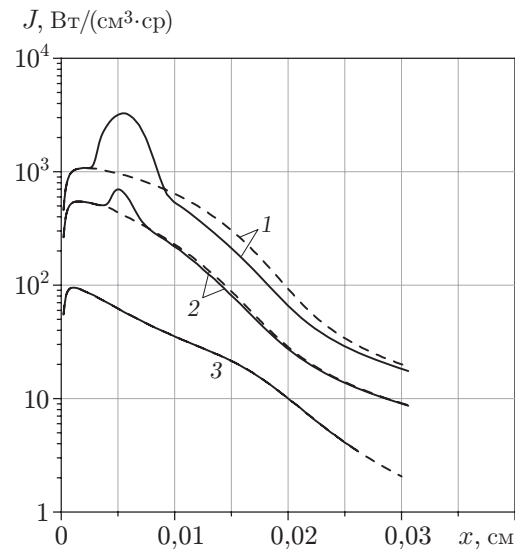


Рис. 2. Профили интенсивности ВУФ-излучения за фронтом ударной волны при $P = 66,661$ Па:

1 — $V = 9,5$ км/с, 2 — $V = 8,5$ км/с, 3 — $V = 7,0$ км/с; сплошные кривые — расчет по модели с учетом возбуждения электронным ударом, штриховые — расчет по модели без учета возбуждения электронным ударом

ВУФ-излучение за ударной волной возникает в очень узкой области, размер которой приближенно равен $0,02$ см (приблизительно 10 длин свободного пробега молекул перед фронтом ударной волны). Заметим, что эта особенность позволяет не рассматривать процесс поглощения ВУФ-излучения в зоне его генерации и использовать спектральную модель оптически тонкой среды. При $V \geq 8,5$ км/с в расчете получен вторичный максимум интенсивности ВУФ-излучения.

На рис. 3 представлены профили интенсивности ВУФ-излучения J , T , T_e и концентрации электронов N_e . Видно, что в рассматриваемых условиях первичный и вторичный максимумы интенсивности ВУФ-излучения появляются в области за ударной волной с температурами T и T_e более $20\,000$ К. Наличие максимума электронной температуры непосредственно за фронтом ударной волны может объясняться появлением “горячих” электронов в процессе ассоциативной ионизации. Этот максимум получен также в серии экспериментов, проведенных в электроразрядной ударной трубе [15]. При экспериментальном и численном моделировании неравновесного излучения в спектральной области с длинами волн более 200 нм, например при исследовании неравновесного излучения в молекулярных системах NO и N_2^+ [5], данный максимум T_e отсутствовал. Это обусловлено тем, что в указанных молекулярных системах максимум интенсивности излучения появлялся позднее, когда электронная температура резко уменьшалась, приближаясь к температуре колебательных степеней свободы молекулы азота.

Наличие вторичного пика интенсивности ВУФ-излучения может быть обусловлено влиянием процессов возбуждения молекул N_2 при столкновении с электронами. Об этом свидетельствуют результаты расчета интенсивности ВУФ-излучения с “выключенными” процессами возбуждения электронным ударом в балансном уравнении (штриховые кривые на рис. 2). Все представленные выше результаты численного моделирования ВУФ-излучения свидетельствуют о его неравновесном характере. При этом, естественно, получаемый результат моделирования зависит от используемой кинетики. Подробный анализ этих зависимостей выходит за рамки данной работы. Следует отметить, что результаты

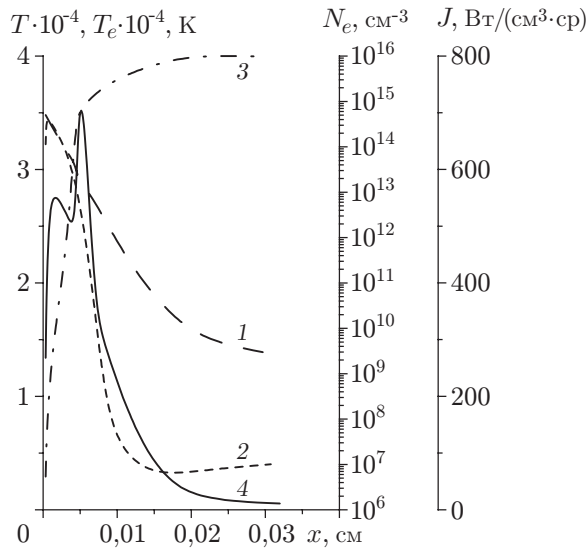


Рис. 3

Рис. 3. Распределения параметров T , T_e , N_e , J за фронтом ударной волны ($V = 8,5$ км/с, $P = 66,661$ Па):

1 — поступательная температура T , 2 — электронная температура T_e , 3 — концентрация электронов N_e , 4 — интенсивность излучения J

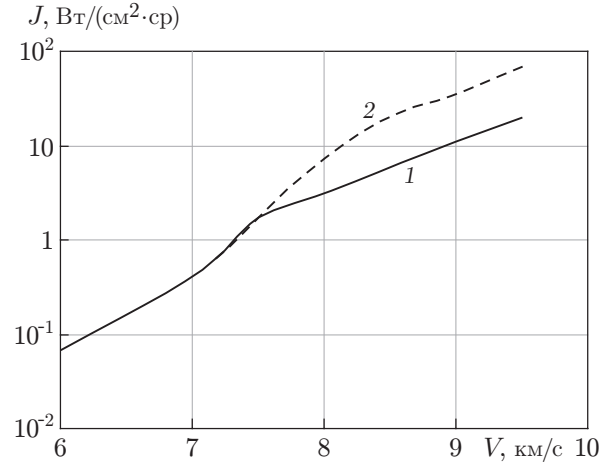


Рис. 4

Рис. 4. Профили интенсивности ВУФ-излучения, полученные с использованием различных моделей колебательно-диссоциационного взаимодействия:

1 — модель Парка, 2 — модель CVDV

экспериментального верифицирования свидетельствуют об адекватности выбранной кинетической модели, основные параметры которой были определены по результатам большого количества исследований особенностей неравновесных излучательных и ионизационных процессов за сильными ударными волнами в воздухе и при высокоскоростном обтекании тел [5, 16].

Ниже изучено влияние различных кинетических моделей неравновесного ВУФ-излучения на результат расчета. На рис. 4 приведена зависимость интенсивности неравновесного ВУФ-излучения от скорости ударной волны, рассчитанная с использованием двух моделей колебательно-диссоциационного взаимодействия. Кривая 1 соответствует результатам расчета, полученным с использованием модели Парка и хорошо согласующимся с данными верификационного эксперимента. Кривая 2 соответствует результатам расчета по модели CVDV. Видно, что при скорости ударной волны $V > 7,5$ км/с расчет с использованием модели CVDV дает завышенный результат.

На рис. 5 показаны профили интенсивности ВУФ-излучения для различных процессов возбуждения систем Берджа — Хопфилда N_2 за ударной волной при столкновениях электронов с тяжелыми частицами и свободными электронами. На рис. 5 кривая 1 соответствует результатам расчета интенсивности ВУФ-излучения, в котором в соответствии с принятой спектральной моделью учтены процессы возбуждения состояний $b^1\Pi_u$ и $b^1\Sigma_u$ молекул азота при столкновениях с тяжелыми частицами (молекулами, атомами) и свободными электронами. Кривая 2 соответствует случаю, когда столкновения молекул азота со свободными электронами не учитываются. Видно, что при скорости $V > 8$ км/с в рассматриваемых условиях столкновения со свободными электронами вносят существенный вклад в генерацию возбужденных состояний систем Берджа — Хопфилда. При этом на

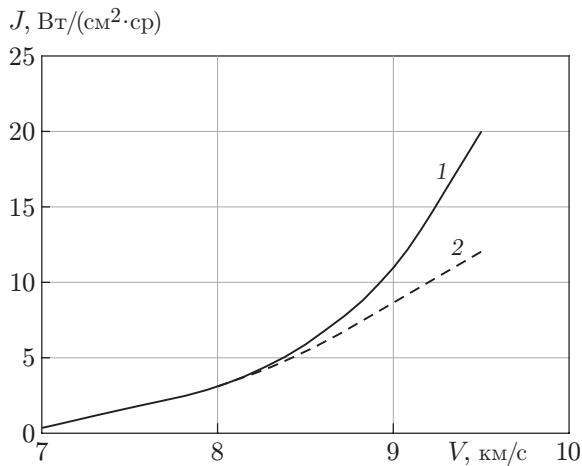


Рис. 5

Рис. 5. Профили интенсивности неравновесного ВУФ-излучения ударной волны для различных процессов возбуждения систем Берджа — Хопфилда при начальном давлении воздуха $P = 66,661$ Па:

1 — модель с учетом возбуждения электронным ударом, 2 — модель без учета возбуждения электронным ударом

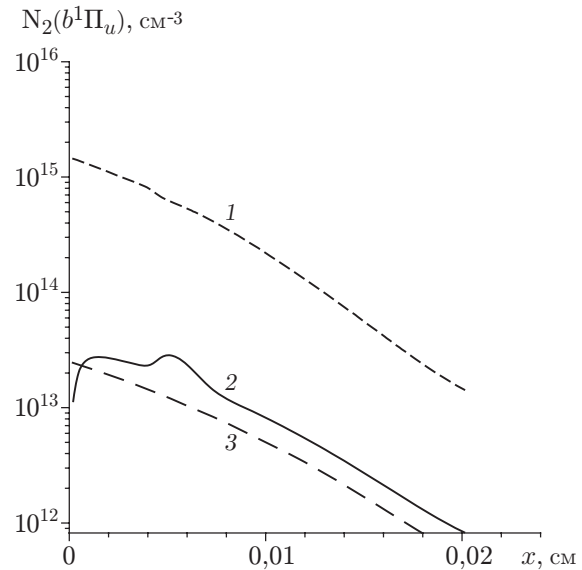


Рис. 6

Рис. 6. Профили плотности возбужденных состояний за ударной волной, полученные с использованием различных моделей:

1 — модель распределения Больцмана при температуре T , 2 — неравновесная модель, 3 — модель QSS

профиле интенсивности неравновесного ВУФ-излучения появляется вторичный пик, что обусловлено электронным возбуждением.

Исследуем влияние различных моделей на плотность возбужденных состояний азота (например, $b^1\Pi_u$). На рис. 6 приведены результаты расчета плотности возбужденных состояний $N_2(b^1\Pi_u)$ за ударной волной в воздухе при $V = 8,5$ км/с. Представлены результаты, полученные с использованием модели Больцмана при температуре T (кривая 1), балансной модели, приведенной в данной работе (кривая 2), и модели QSS (кривая 3). Видно, что модель Больцмана, используемая при термодинамическом моделировании процессов излучения при высокоскоростном обтекании тел, в рассматриваемых условиях может привести к существенному завышению интенсивности ВУФ-излучения. Результаты расчетов по модели, используемой в данной работе, в целом согласуются с результатами расчетов по QSS-модели. Однако следует отметить, что при использовании QSS-модели отсутствует вторичный максимум заселенности возбужденного состояния (см. рис. 6).

Заключение. Результаты исследований, проведенных в данной работе, позволяют сделать следующие выводы. Разработана физико-химическая модель для определения интенсивности неравновесного ВУФ-излучения ударной волны в воздухе в молекулярных системах Берджа — Хопфилда с учетом кинетики заселенности возбужденных состояний. Кинетическая модель описывает неравновесный характер физико-химических процессов, происходящих за фронтом ударной волны. В ходе верификационных исследований установлено, что в рассмотренных условиях результаты расчетов по этой модели хорошо согласуются с экспериментальными данными.

В рассмотренных условиях ВУФ-излучение ударной волны имеет существенно неравновесный характер. Максимум интенсивности ВУФ-излучения возникает в оптически тонком слое за фронтом ударной волны, причем при скорости ударной волны $V < 8$ км/с основную роль в возбуждении систем Берджа — Хопфилда играют столкновения молекулы N_2 с атомами и молекулами, а при $V > 8$ км/с — соударения молекулы N_2 с электронами в высокотемпературной зоне за ударной волной.

Авторы выражают благодарность С. Т. Суржикову за предоставленные данные о спектроскопических характеристиках.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Bose D., McCorkle E., Bogdanoff D., Allen G. (Jr.)** Comparisons of air radiation model with shock tube measurements. Orlando, 2009. (Paper / AIAA; N 2009-1030).
2. **Bose D., McCorkle E., Thompson C., et al.** Analysis and model validation of shock layer radiation in air. Reno, 2008. (Paper / AIAA; N 2008-1246).
3. **Горелов В. А., Киреев А. Ю.** Неравновесное излучение ударной волны в воздухе в области вакуумного ультрафиолета // Письма в ЖТФ. 2012. Т. 38, № 24. С. 46–52.
4. **Горелов В. А., Киреев А. Ю.** Физико-химическая модель формирования неравновесного излучения N_2 в области вакуумного ультрафиолета за ударной волной в воздухе // Физ.-хим. кинетика в газовой динамике. [Электрон. ресурс]. Режим доступа: www.chemphys.edu.ru/pdf/2014-10-09-001.pdf.
5. **Gorelov V. A., Gladyshev M. K., Kireev A. Yu., et al.** Experimental and numerical study of nonequilibrium ultraviolet NO and $N_2^+(1-)$ emission in shock layer // J. Thermophys. Heat Transfer. 1998. V. 12, N 2. P. 172–180.
6. **Суржиков С. Т.** Оптические свойства газов и плазмы. М.: Моск. гос. техн. ун-т им. Н. Э. Баумана, 2004.
7. **Johnston C. O.** Nonequilibrium shock-layer radiative heating for earth and titan entry: Diss. Ph. D. Blacksburg, 2006.
8. **Cartwright D. C.** Rate coefficients and inelastic momentum transfer cross sections for electronic excitation of N_2 by electrons // J. Appl. Phys. 1976. V. 49, N 7. P. 3855–3862.
9. **Laux C. O.** Optical diagnostics and radiative emission of air plasmas: HTLG Rep. Stanford Univ. N T-288. Stanford, 1993.
10. **Marrone P. V., Treanor C. E.** Chemical relaxation with preferential dissociation from excited vibrational levels // Phys. Fluids. 1963. V. 6, N 9. P. 1215–1221.
11. **Bose D., Candler G. V.** Advanced model of nitric formation in hypersonic flows // J. Thermophys. Heat Transfer. 1998. V. 12, N 2. P. 214–222.
12. **Касьянов В. А., Подлубный Л. И.** О теории ассоциативной ионизации // Тр. юбил. конф. Моск. энерг. ин-та. Сер. физ. М.: Моск. энерг. ин-т, 1968. С. 131–141.
13. **Смирнов Б. М.** Атомные столкновения и элементарные процессы в плазме. М.: Атомиздат, 1968.
14. **Киреев А. Ю.** Колебательная релаксация молекул в присутствии электронного газа // Учен. зап. Центр. аэрогидродинам. ин-та. 1981. Т. 12, № 5. С. 34–39.
15. **Gorelov V. A., Kireev A. Yu., Kildushova L. A.** Ionization particularities behind intensive shock waves in air at velocities of 8–15 km/s. Colorado Springs, 1994. (Paper / AIAA; N 94-2051).
16. **Горелов В. А., Киреев А. Ю., Шиленков С. В.** Фотоионизация воздуха перед головной ударной волной около летательного аппарата при скорости полета 6–8 км/с // Учен. зап. Центр. аэрогидродинам. ин-та. 2012. Т. 43, № 5. С. 15–26.

*Поступила в редакцию 9/IX 2014 г.,
в окончательном варианте — 12/II 2015 г.*