

# Numerical Simulation of 2D Structure of the Glow Discharge in Molecular Hydrogen in View of Ionization and Dissociation Kinetics

D.A. Storozhev<sup>1,2,3</sup>, S.E. Kuratov<sup>2</sup>, S.T. Surzhikov<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institute for Problem in Mechanics Russian Academy of Science (IPMech RAS), Moscow 119526,

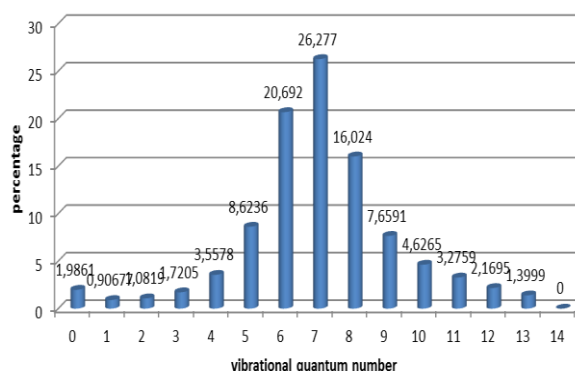
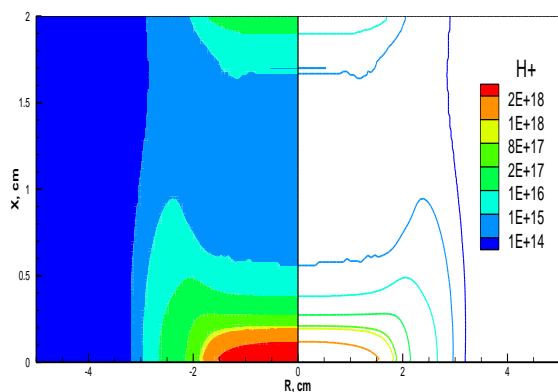
<sup>2</sup> Center for Basic and Applied Research, All-Russian Scientific Research Institute of Automatics, Moscow, 127055, Russia

<sup>3</sup> Moscow Institute for Physics and Technology (MIPT), Moscow, Russia  
dmitry.stor@gmail.com

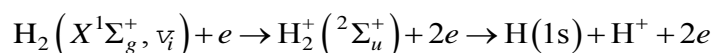
## Abstract

A two-dimensional computer model of glow discharge in axisymmetric geometry in molecular hydrogen is presented. The structure of a glow discharge is described within the diffusion-drift model. The model consists of continuity equations for electron and ion fluids, the Poisson equation for the self-consistent electric field, and equation for gas temperature, kinetic parameters of the model are calculated by solving the electron Boltzmann equation. Kinetics of ionization and dissociation is described with the use of the system of state-to-state equations.

Keywords: glow discharge, drift-diffusion model, kinetic of hydrogen ionization and dissociation.



Spatial distribution of the atomic hydrogen ions  $H^+$  ( $m^{-3}$ ) and the percentage of atomic hydrogen  $H$  formed from different excited vibrational states in reaction



УДК 533.92

# Численное моделирование 2D структуры тлеющего разряда в молекулярном водороде с учетом кинетики ионизации и диссоциации

Д.А. Сторожев<sup>1,2,3</sup>, С.Е. Куратов<sup>2</sup>, С.Т. Суржиков<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Институт проблем механики Российской академии наук,  
Россия, Москва, 119526, проспект Вернадского, 101-1*

<sup>2</sup> *Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова  
Россия, Москва, 127055, Суцневская ул., 22*

<sup>3</sup> *Московский физико-технический институт (государственный университет)  
dmitry.stor@gmail.com*

## Аннотация

В работе представлена двумерная компьютерная модель тлеющего разряда в молекулярном водороде в осесимметричной геометрии. Структура тлеющего разряда описывается с помощью диффузионно-дрейфовой модели. Модель состоит из уравнений непрерывности для электронов и ионов, уравнения Пуассона для самосогласованного электрического поля, и уравнения теплопроводности для нейтрального газа. Кинетические параметры модели рассчитывались из решения кинетического уравнения Больцмана, а кинетика ионизации и диссоциации водорода описывалась с помощью кинетических поуровневых уравнений.

Ключевые слова: тлеющий разряд, диффузионно-дрейфовая модель, кинетика ионизации и диссоциации водорода.

## 1. Введение

Положительный столб тлеющего разряда постоянного тока является одним из наиболее распространенных и ярко выраженных примеров слабоионизованной неравновесной плазмы, поддерживаемой электрическим полем. [1–5] Для тлеющего разряда характерны давления  $p \sim 1 \div 10$  Торр, напряжения на электродах  $V \sim 10^2 \div 10^3$  В, токи  $I \sim 10^{-3}$  А. Тлеющие разряды широко используются в качестве активной среды лазера, различных газосветных приборах и т.д. Данный тип разрядов характеризуется большим многообразием физико-химических процессов протекающих в неравновесной плазме, таких как ионизация и диссоциация молекулы электронным ударом, возбуждение и релаксация внутренних степеней свободы молекул, набор электронами энергии в электрическом поле и передача этой энергии в столкновениях с тяжелыми молекулами и атомами и т.д. Большое количество данных по сечениям рассеяния и константам скоростей элементарных процессов с участием, а также возрастающая производительность компьютеров позволяют создавать компьютерные модели тлеющего разряда, включающие все многообразие и сложность кинетических процессов, протекающих в разряде.

Целью данной работы является численное моделирование электродинамической структуры тлеющего разряда в молекулярном водороде, описываемой с помощью диффузионно-дрейфовой модели с кинетическими параметрами, рассчитанными из решения кинетического уравнения Больцмана для электронов, а также расчет заселенностей колебательных состояний, концентраций молекулярных и атомарных ионов в различных пространственных областях тлеющего разряда на основе решения поуровневых кинетических уравнений.

## 2. Постановка задачи

Численная модель тлеющего разряда формулируется для осесимметричной геометрии. Предполагается, что разряд горит в режиме нормальной плотности тока между двумя плоскими электродами (рис. 1), так что граничные эффекты в радиальном направлении не оказывают влияния на структуру разряда.

Структура тлеющего разряда описывается с использованием уравнений диффузионно-дрейфовой модели, сформулированной для электронной и ионной компонент. Модель включает также уравнение Пуассона, определяющее распределение электрического потенциала в газоразрядной камере, а также закон сохранения энергии нейтральных частиц в форме уравнения теплопроводности.

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \operatorname{div} \Gamma_e = \alpha(E/p) |\Gamma_e| - \beta n_+ n_e, \quad (1)$$

$$\frac{\partial n_+}{\partial t} + \operatorname{div} \Gamma_+ = \alpha(E/p) |\Gamma_+| - \beta n_+ n_e, \quad (2)$$

$$\operatorname{div}(\operatorname{grad} \varphi) = 4\pi(n_e - n_+), \quad (3)$$

$$\rho c_V \frac{\partial T}{\partial t} = \operatorname{div}(\lambda \operatorname{grad} T) + Q, \quad (4)$$

$$\Gamma_e = -D_e \operatorname{grad} n_e - n_e \mu_e \mathbf{E}, \quad \Gamma_+ = -D_+ \operatorname{grad} n_+ - n_+ \mu_+ \mathbf{E},$$

где  $\mathbf{E} = -\operatorname{grad} \varphi$ ,  $Q = \eta(\mathbf{j} \cdot \mathbf{E})$ ,  $\mathbf{j} = e(\Gamma_+ - \Gamma_e)$ ;  $x, r$  – аксиальная и радиальная координаты;  $T, p$  – температура и давление газа;  $n_e$  and  $n_+$  – концентрации электронов и ионов;  $\mathbf{E}$  and  $\varphi$  – вектор напряженности электрического поля и его потенциал;  $\Gamma_e, \Gamma_+$  – векторы потоков электронов и ионов;  $D_e, D_+$  – коэффициенты диффузии электронов и ионов;  $\mu_e, \mu_+$  – подвижности электронов и ионов;  $\alpha = \alpha(E/p)$  – коэффициент ударной ионизации молекул электронами (1-й коэффициент Таунсенда);  $\beta$  – коэффициент ион-электронной рекомбинации;  $\eta$  – коэффициент эффективности передачи Джоулева тепла на нагрев газа.

При решении уравнений (1)–(4) использовалась ортогональная цилиндрическая система координат. Граничные условия для уравнений (1)–(3) имеют следующий вид:

$$x = 0, \Gamma_{e,x} = \gamma \Gamma_{+,x}, \frac{\partial n_+}{\partial x} = 0, \varphi = 0,$$

$$x = H, \frac{\partial n_e}{\partial x} = 0, n_+ = 0, \varphi = V,$$

$$r = 0, \frac{\partial n_e}{\partial r} = \frac{\partial n_+}{\partial r} = \frac{\partial \varphi}{\partial r} = 0$$

$$r = R, 1) n_+ = n_e = 0, \varphi = \frac{V}{H} x,$$

$$\text{или } 2) \frac{\partial n_e}{\partial r} = \frac{\partial n_+}{\partial r} = \frac{\partial \varphi}{\partial r} = 0$$

Здесь  $\gamma$  – коэффициент вторичной электронной эмиссии с поверхности катода;  $V$  – падение потенциала электрического поля на газоразрядном промежутке;  $\Gamma_{e,x}, \Gamma_{+,x}$  – проекции потоков электронов и ионов на ось  $x$ .

Заметим, что граничные условия для рассматриваемой системы уравнений диффузионно-дрейфовой модели (1)–(3) являются приближенными. Применимость данных граничных условий обсуждалась в работах [3–4].

Для того, чтобы рассчитать падение потенциала на разрядном промежутке необходимо учитывать влияния внешней цепи. В случае квазистационарного горения тлеющего разряда закон Ома будет иметь следующий вид:

$$\frac{\varepsilon - V}{eR_0} = 2\pi \int_0^R \Gamma_e(r, x = H) r dr,$$

выражающий равенство электродвижущей силы  $\varepsilon$  сумме падений потенциала на резисторе  $R_0$  и разрядном промежутке.

### 3. Кинетические параметры модели

Значения коэффициента ионизации (1го коэффициента Таунсенда), подвижности и диффузии рассчитывались по следующим формулам:

$$\mu_e N = -\frac{\gamma'}{3} \int_0^\infty \frac{\varepsilon}{\sigma_m} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\varepsilon, \quad D_e N = \frac{\gamma'}{3} \int_0^\infty \frac{\varepsilon}{\sigma_m} f_0 d\varepsilon,$$

$$k_{ioniz} = \frac{\gamma' \int_0^\infty \varepsilon \sigma_{ioniz} f_0 d\varepsilon}{N n_e}, \quad \frac{\alpha(E/N)}{N} = \frac{k_{ioniz}}{\mu_e E} \gamma' = \sqrt{\frac{2e}{m_e}},$$

где  $N$  – концентрация нейтральных молекул газа;  $\sigma_m$  – транспортное сечение рассеяния электронов на молекулах;  $\sigma_{ioniz}$  – сечение ионизации;  $\varepsilon$  – энергия электронов в eV;  $f_0$  – функция распределения электронов по энергиям;  $k_{ioniz}$  – константа скорости ионизации электронным ударом;  $e$  и  $m_e$  – заряд и масса электрона.

Функция распределения электронов по энергиям рассчитывается из решения кинетического уравнения Больцмана, на основе методики, изложенной ниже.

В данной работе учитывалось изменение температуры нейтрального газа. В соответствии с этим зависимость транспортных и термофизических свойств от температуры задавались следующими формулами:

$$\mu_i(p^*) = \frac{2280}{p^*} \frac{\text{cm}^2}{\text{Volt} \cdot \text{s}}, \quad p^* = p \frac{293}{T}, \text{ Torr},$$

$$D_i = \mu_i(p^*) T, \quad c_p = 8.314 \frac{7}{2} \frac{1}{M_\Sigma} \frac{\text{J}}{\text{g} \cdot \text{K}}, \quad M_\Sigma = 28 \frac{\text{g}}{\text{mol}},$$

$$\rho = 1.58 \times 10^{-5} \frac{M_\Sigma p}{T} \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}, \quad \lambda = \frac{8.334 \times 10^{-4}}{\sigma^2 \Omega^{(2,2)*}} \sqrt{\frac{T}{M_\Sigma}} \left( 0.115 + 0.354 \frac{c_p M_\Sigma}{R_g} \right),$$

$$\Omega^{(2,2)*} = \frac{1.157}{(T^*)^{0.1472}}, \quad T^* = \frac{T}{(\varepsilon/k)}, \quad (\varepsilon/k) = 71.4 \text{ K}, \quad \sigma = 3.68 \text{ \AA}, \quad R_g = 8.314 \frac{\text{J}}{\text{K} \cdot \text{mol}},$$

где  $p$  – начальное давление. Коэффициент рекомбинации  $\beta$  был положен равным  $\beta = 2 \times 10^{-7} \text{ cm}^3/\text{s}$ .

### 4. Кинетическое уравнение Больцмана

Кинетическое уравнение Больцмана для электронов решается для того, чтобы учесть влияние неравновесной ФРЭЭ на кинетические параметры плазмы тлеющего разряда. В

данной работе уравнение Больцмана для электронов решается в дву-членном приближении (приближение Лоренца):

$$\frac{E^2}{3} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left( \frac{\varepsilon}{N \sigma_{el}} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) + \frac{2m_e}{M} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} (\varepsilon^2 N \sigma_{el} f) + \frac{2m_e kT}{Me} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left( \varepsilon^2 N \sigma_{el} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) = C_0^{vib} + C_0^{el}, \quad (5)$$

$$C_0^{vib} = \varepsilon f(\varepsilon) \sum_{\nu=0}^{N_v^*-1} N_\nu^{vib} \sum_{w=\nu+1}^{N_v^*} \sigma_{\nu \rightarrow w}^{vib}(\varepsilon) - \sum_{\nu=0}^{N_v^*-1} N_\nu^{vib} \sum_{w=\nu+1}^{N_v^*} (\varepsilon + \varepsilon_{\nu \rightarrow w}^{vib}) f(\varepsilon + \varepsilon_{\nu \rightarrow w}^{vib}) \sigma_{\nu \rightarrow w}^{vib}(\varepsilon + \varepsilon_{\nu \rightarrow w}^{vib}) +$$

$$+ \varepsilon f(\varepsilon) \sum_{\nu=1}^{N_v^*} N_\nu^{vib} \sum_{w=\nu-1}^{N_v^*-1} \sigma_{\nu \rightarrow w}^{vib}(\varepsilon) - \sum_{\nu=1}^{N_v^*} N_\nu^{vib} \sum_{w=\nu-1}^{N_v^*-1} (\varepsilon - \varepsilon_{\nu \rightarrow w}^{vib}) f(\varepsilon - \varepsilon_{\nu \rightarrow w}^{vib}) \sigma_{\nu \rightarrow w}^{vib}(\varepsilon - \varepsilon_{\nu \rightarrow w}^{vib}),$$

$$C_0^{el} = \varepsilon f(\varepsilon) N_0^{vib} \sum_{\nu=1}^{N_e^*} \sigma_{0 \rightarrow \nu}^{el}(\varepsilon) - \sum_{\nu=1}^{N_e^*} (\varepsilon + \varepsilon_{0 \rightarrow \nu}^{el}) f(\varepsilon + \varepsilon_{0 \rightarrow \nu}^{el}) N_0^{vib} \sigma_{0 \rightarrow \nu}^{el}(\varepsilon + \varepsilon_{0 \rightarrow \nu}^{el}) +$$

$$+ \varepsilon f(\varepsilon) \sum_{\nu=1}^{N_e^*} N_\nu^{el} \sigma_{\nu \rightarrow 0}^{el}(\varepsilon) - \sum_{\nu=1}^{N_e^*} (\varepsilon - \varepsilon_{\nu \rightarrow 0}^{el}) f(\varepsilon - \varepsilon_{\nu \rightarrow 0}^{el}) N_\nu^{el} \sigma_{\nu \rightarrow 0}^{el}(\varepsilon - \varepsilon_{\nu \rightarrow 0}^{el}),$$

где  $\varepsilon = m_e v^2 / 2e$ ;  $v, e, m_e$  – скорость, заряд и масса электрона;  $M, N, T$  – масса, концентрация и температура молекул водорода;  $N_\nu^{el}, N_\nu^{vib}$  – заселенности электронно- и колебательно-возбужденных состояний;  $E$  – напряженность электрического поля;  $\sigma_{el}$  – транспортное сечение рассеяния;  $\sigma_{\nu \rightarrow w}^{vib}, \sigma_{\nu \rightarrow w}^{el}$  – сечение неупругого возбуждения колебательных состояний основного электронного уровня, а также различных электронных состояний молекул водорода;  $\varepsilon_{\nu \rightarrow w}^{vib}, \varepsilon_{\nu \rightarrow w}^{el}$  – пороговые значения энергии;  $N_v^*, N_e^*$  – суммарное количество неупругих процессов колебательного и электронного возбуждения молекул. Функция распределения нормируется следующим условием:

$$\int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} f(\varepsilon) d\varepsilon = 1$$

Сечения процессов девозбуждения рассчитываются с использованием соотношения Клейна – Росселанда, выражающего принцип детального равновесия для соударений 1го и 2го рода

$$(\varepsilon - \varepsilon_{\nu \rightarrow w}) \sigma_{w \rightarrow \nu}(\varepsilon - \varepsilon_{\nu \rightarrow w}) = \exp(-\varepsilon_{\nu \rightarrow w}) \varepsilon \sigma_{\nu \rightarrow w}(\varepsilon), \quad \varepsilon \geq \varepsilon_{\nu \rightarrow w}, \quad w > \nu$$

Хорошо известно, что значительная часть энергии электронов тратится на возбуждение колебательных степеней свободы молекул. Доля этой энергии рассчитывается из решения кинетического уравнения Больцмана. Очевидно также, что доля энергии, вложенной во внутренние степени свободы, по отношению к Джоулеву нагреву газа будет различной в разных пространственных областях тлеющего разряда.

Расчет доли энергии, затраченной на возбуждение внутренних степеней свободы, выполнялся с использованием следующей методики: сначала рассчитывались константы скорости неупругих столкновений электронов с молекулами, затем рассчитывалось отношение суммарных затрат энергии во все рассматриваемые колебательные или электронные состояния к Джоулеву теплу:

а) Колебательное возбуждение:

$$k_{\nu \rightarrow w}^{vib} = \gamma' \int_0^{\infty} \varepsilon \sigma_{\nu \rightarrow w}^{vib}(\varepsilon) f_0(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (6)$$

$$E_{exit} = \sum_{\nu=0}^{N_{\nu}^*-1} \sum_{w=\nu+1}^{N_{\nu}^*} N_{\nu} n_e k_{\nu \rightarrow w}^{vib} \mathcal{E}_{\nu \rightarrow w}^{vib} - \sum_{\nu=1}^{N_{\nu}^*} \sum_{w=\nu-1}^{N_{\nu}^*-1} N_{\nu} n_e k_{\nu \rightarrow w}^{vib} \mathcal{E}_{\nu \rightarrow w}^{vib},$$

$$\eta^{vib} = \frac{E_{exit}^{vib}}{\mathbf{j} \cdot \mathbf{E}}$$

б) Электронное возбуждение:

$$k_{\nu \rightarrow w}^{el} = \gamma' \int_0^{\infty} \varepsilon \sigma_{\nu \rightarrow w}^{el}(\varepsilon) f_0(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (7)$$

$$E_{exit} = \sum_{w=1}^{N_e^*} N_{\nu} n_e k_{0 \rightarrow w}^{el} \mathcal{E}_{0 \rightarrow w}^{el} - \sum_{\nu=1}^{N_{\nu}^*} N_{\nu} n_e k_{\nu \rightarrow 0}^{el} \mathcal{E}_{\nu \rightarrow 0}^{el},$$

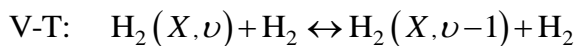
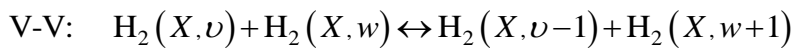
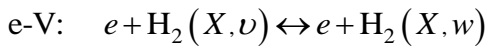
$$\eta^{el} = \frac{E_{exit}^{el}}{\mathbf{j} \cdot \mathbf{E}}$$

## 5. Поуровневая колебательная кинетика

Колебательная кинетика молекулярного водорода в основном электронном  $H_2(X^1\Sigma_g^+, \nu)$  (далее используется обозначение  $H_2(X, \nu)$ ) описывается моделью поуровневой кинетики ангармонических осцилляторов, которая включает процессы возбуждения колебательных состояний электронным ударом, (eV) and колебательно-колебательный (VV) и колебательно-поступательный (VT) энергообмен в приближении одноквантовых переходов[1]:

$$\begin{aligned} \frac{dH_2(X, \nu)}{dt} = & n_e \sum_{w<\nu} H_2(X, w) k_{w \rightarrow \nu}^{vib} + n_e \sum_{w>\nu} H_2(X, w) k_{w \rightarrow \nu}^{vib} - \\ & - n_e H_2(X, \nu) \left( \sum_{w<\nu} k_{\nu \rightarrow w}^{vib} + \sum_{w>\nu} k_{\nu \rightarrow w}^{vib} \right) + H_2(X, \nu-1) \sum_{w>0} H_2(X, w) K_{n-1, \nu}^{w+1, w} + \\ & + H_2(X, \nu+1) \sum_w H_2(X, w) K_{\nu+1, \nu}^{w, w+1} - H_2(X, \nu) \sum_w H_2(X, w) K_{\nu, \nu-1}^{w, w+1} - \\ & - H_2(X, \nu) \sum_m H_2(X, w+1) K_{\nu, \nu+1}^{w-1, w} + H_2(X, \nu-1) [H_2] P_{\nu-1, \nu} + \\ & + H_2(X, \nu+1) [H_2] P_{\nu+1, \nu} - H_2(X, \nu) [H_2] P_{\nu, \nu-1} - H_2(X, \nu) [H_2] P_{\nu, \nu+1}, \end{aligned}$$

где  $\nu$  и  $w$  – колебательные квантовые числа,  $[H_2]$  концентрация молекул водорода. Различные каналы энергообмена описываются следующими символическими уравнениями:



Для описания процессов возбуждения и девозбуждения колебательных состояний молекулярного водорода рассматривались 14 колебательных состояний молекулы. Константы скорости процессов возбуждения колебательных состояний электронным ударом рассчитывались как свертка рассчитанной из уравнения Больцмана ФРЭЭ с соответствующим сечением рассеяния (6).

Для VT процессов:

$$P_{\nu+1,\nu}(T) = (\nu+1)P_{1,0} \exp(\nu\delta_{VT}) \exp\left(-\frac{\nu hc\omega_e \chi_e}{kT}\right),$$

$$P_{\nu,\nu+1}(T) = P_{\nu+1,\nu}(T) \exp\left[-\frac{(\omega_e - 2\omega_e \chi_e)hc}{kT}\right] \exp\left(-\frac{2\nu hc\omega_e \chi_e}{kT}\right),$$

$$P_{0,1}(T) = P_{1,0}(T) \exp\left[-\frac{(\omega_e - 2\omega_e \chi_e)hc}{kT}\right],$$

$$\delta_{VT} = 0.87, \quad P_{1,0} = 4.61 \times 10^{-16} \text{ см}^3/\text{с}$$

Для VV процессов:

$$K_{\nu+1,\nu}^{w,w+1} = (w+1)(\nu+1) K_{1,0}^{0,1} \exp(-\delta_{VV} |\nu-w|) \left[ \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \exp(-\delta_{VV} |\nu-w|) \right] \exp\left(|\nu-w| \frac{hc\omega_e \chi_e}{kT}\right),$$

$$K_{\nu,\nu+1}^{w+1,w} = K_{\nu+1,\nu}^{w,w+1} \exp\left(\frac{2(\nu-w)hc\omega_e \chi_e}{kT}\right),$$

$$\delta_{VV} = 1.06, \quad K_{1,0}^{0,1} \approx 3.9 \times 10^{-13} \text{ см}^3/\text{с}.$$

## 6. Кинетика плазмохимических реакций

Численное моделирование тлеющего разряда в молекулярном водороде проводилось в геометрии, показанной на рис. 1 для следующих исходных данных:  $\varepsilon = 1000 \text{ V}$ ,  $\gamma = 0.1$ ,  $R_0 = 300 \text{ k}\Omega$ ,  $T_e = 11600 \text{ K}$ ,  $H = 2 \text{ см}$ . Структура тлеющего разряда рассчитывалась с учетом решения кинетического уравнения и системы кинетических поуровневым уравнений для заселенностей.

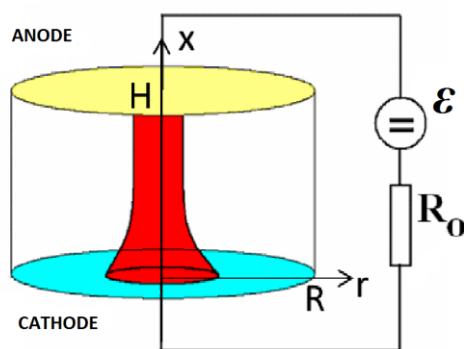


Рис. 1. Схема тлеющего разряда

Хорошо известно, что в области горения тлеющего разряда протекает большое количество плазмохимических процессов [9–13]. В первую очередь – процессы прямого возбуждения колебательных состояний электронным ударом, ступенчатого механизма возбуждения колебательных состояний, протекающего через возбуждение электронных состояний  $B^1\Sigma_u^+$ ,  $C^1\Pi_u$ , ионизации частиц электронным ударом, процессов диссоциативной ионизации, ступенчатой диссоциации молекул, протекающих через электронно-возбужденные состояния  $B^1\Sigma_u^+$ ,  $C^1\Pi_u$ ,  $B'^1\Sigma_u^+$ ,  $D^1\Pi_u$ ,  $B''^1\Sigma_u^+$ ,  $D^1\Pi_u$ ,  $b^3\Sigma_u^+$ , химических реакций с участием тяжелых молекул и атомов. В данной работе учитывались следующие кинетические реакции:

1.  $e + \text{H}_2(\text{X}, v) \rightarrow e + \text{H}_2(\text{X}, v')$
2.  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(B^1\Sigma_u^+, C^1\Pi_u, v') + e \rightarrow \text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_f) + e + hv$
3.  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2^+(X^2\Sigma_g^+) + e$
4.  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2^+(X^2\Sigma_g^+) + 2e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}^+ + 2e$
5.  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2^+(^2\Sigma_u^+) + 2e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}^+ + 2e$
6.  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(B^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}(2l) + e$
7.  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(C^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}(2l) + e$
8.  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(B^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow 2\text{H} + e$
9.  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(D^1\Pi_u) + e \rightarrow 2\text{H} + e$
10.  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(B''^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow 2\text{H} + e$
11.  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(D^1\Pi_u) + e \rightarrow 2\text{H} + e$
12.  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(b^3\Sigma_u^+) + e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}(1s) + e$
13.  $\text{H} + e \rightarrow \text{H}^+ + e + e$
14.  $\text{H}_2(X, w) + \text{H}_2(X, v) \leftrightarrow \text{H}_2(X, w-1) + \text{H}_2(X, v+1)$
15.  $\text{H}_2(X, w) + \text{H}_2 \leftrightarrow \text{H}_2(X, w-1) + \text{H}_2$
16.  $\text{H}_2^+ + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{H}^+$

Первая реакция описывает прямое колебательное возбуждение молекулы водорода электронным ударом. Набор сечений для этой реакции, также как и для реакций ионизации электронным ударом был взят из работы A.V. Phelps. Реакция № 2 описывает колебательное возбуждение молекулы через возбуждение синглетных электронных уровней  $B^1\Sigma_u^+$ ,  $C^1\Pi_u$ , реакция № 3 описывает ионизацию молекулы электронным ударом из различных колебательно-возбужденных состояний основного электронного состояния, механизмы № 4–5 описывают процессы диссоциативной ионизации, протекающих через состояния  $\text{H}_2^+(X^2\Sigma_g^+)$  и  $\text{H}_2^+(^2\Sigma_u^+)$ , реакции № 6–12 описывают ступенчатый механизм диссоциации молекулы электронным ударом через возбужденные синглетные ( $B^1\Sigma_u^+$ ,  $C^1\Pi_u$ ,  $B''^1\Sigma_u^+$ ,  $D^1\Pi_u$ ,  $B''^1\Sigma_u^+$ ,  $D^1\Pi_u$ ) и триплетные состояния ( $b^3\Sigma_u^+$ ). Сечения рассеяния процессов № 3–12 были взяты из работ [6–8].

Более подробное описание кинетической схемы, используемой в работе, дано в Таблице 13.

Сечения рассеяния для процессов 1–13 даны на рис. 2–14. Константы скорости процессов рекомбинации рассчитывались на основе принципа детального равновесия. Константы скорости реакций № 15 и № 16 (VV и VT-переходы) рассчитывались с использованием методики, описанной в разделе VI. Константа скорости реакции № 17 взята из работы [9]

$$k_{17} = 9 \times 10^{-16} \text{ м}^3/\text{с}$$

Константы скорости процессов 1–13 рассчитывались как свертка функции распределения электронов по энергиям с соответствующим сечением рассеяния.



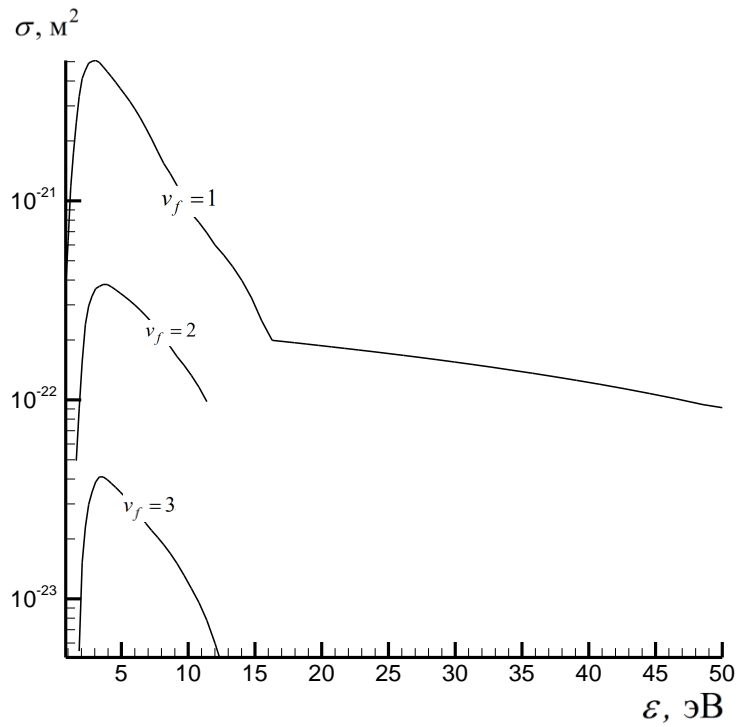


Рис. 2. Сечения рассеяния прямого колебательного возбуждения молекулы водорода электронным ударом  $e + \text{H}_2(X, 0) \rightarrow e + \text{H}_2(X, v_f)$

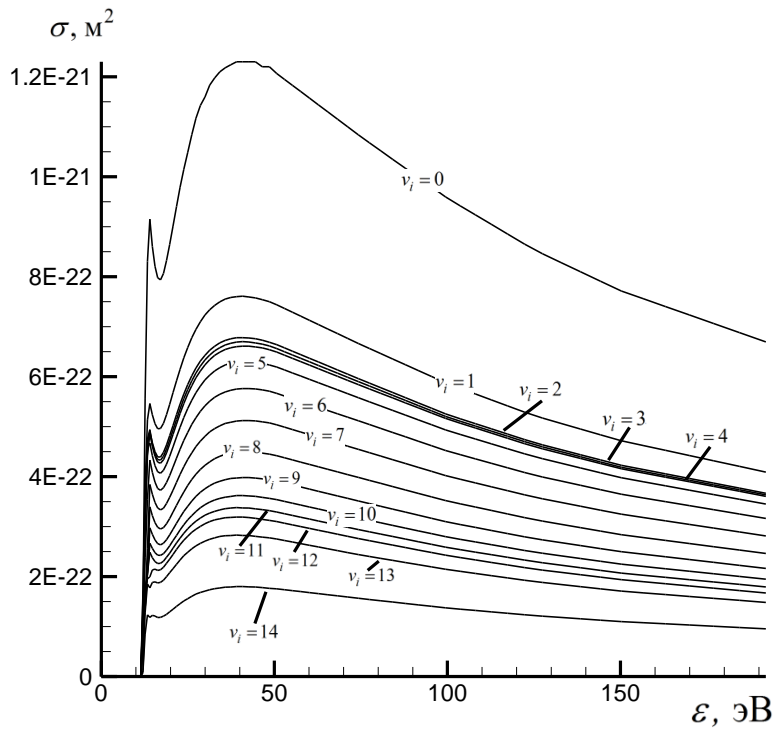


Рис. 3 Сечения рассеяния ступенчатого механизма колебательного возбуждения молекулы  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i = 0) + e \rightarrow \text{H}_2(B^1\Sigma_u^+, C^1\Pi_u, v') + e \rightarrow \text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_f) + e + h\nu$

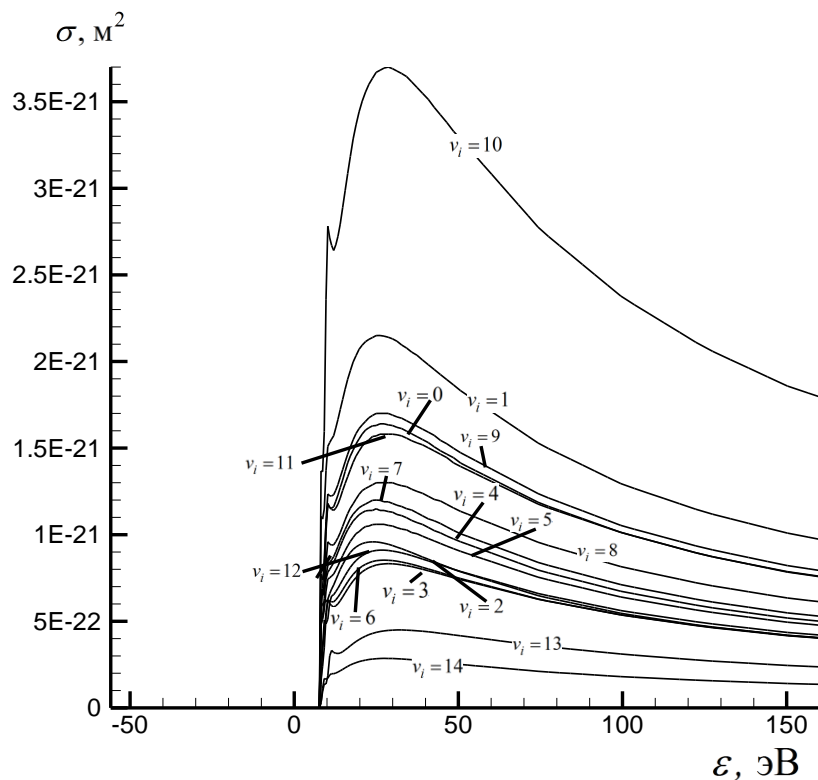


Рис. 4. Сечения рассеяния как функция энергии электрона и начального колебательного квантового числа для реакции

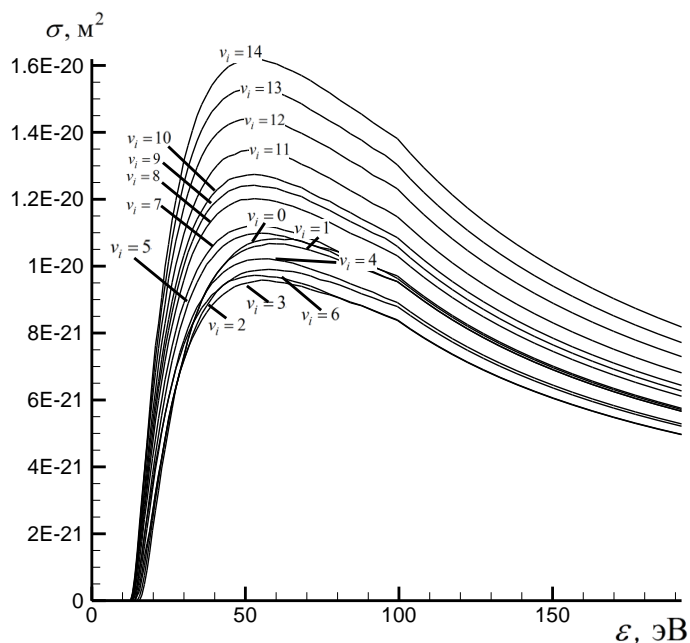
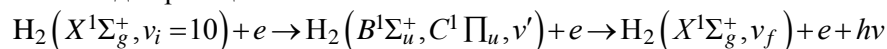


Рис. 5. Сечения рассеяния как функция энергии электрона и начального колебательного квантового числа для реакции  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2^+(X^2\Sigma_g^+) + e$

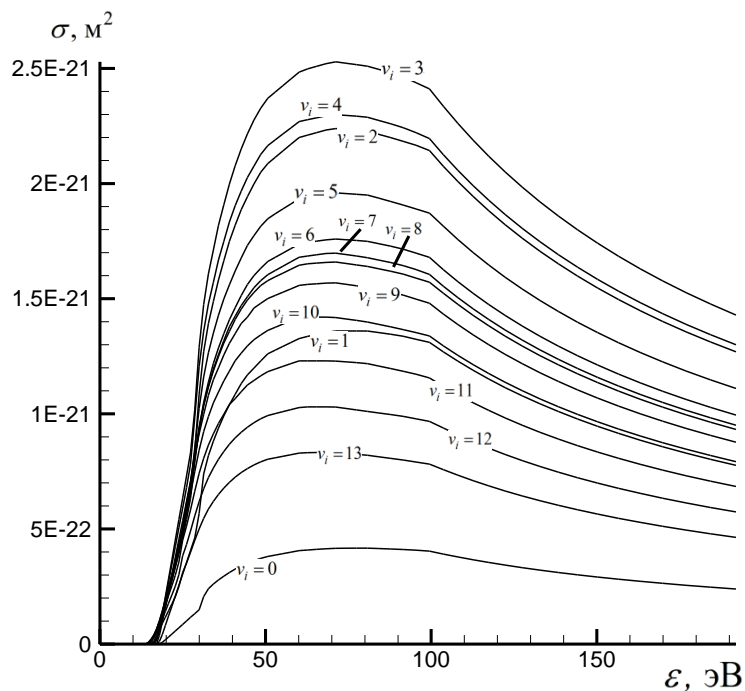


Рис. 6. Сечения рассеяния как функция энергии электрона и начального колебательного квантового числа для реакции  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2^+(X^2\Sigma_g^+) + 2e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}^+ + 2e$

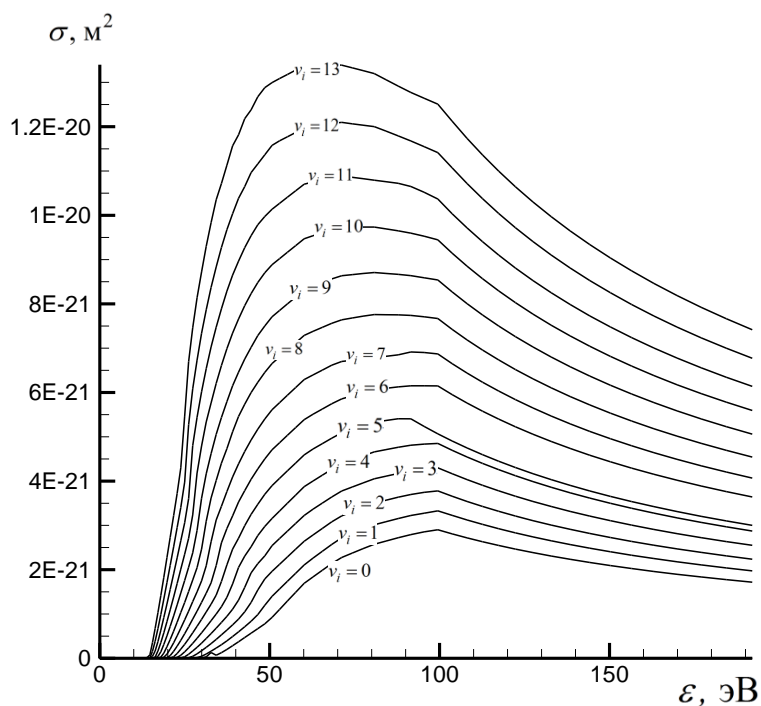


Рис. 7. Сечения рассеяния как функция энергии электрона и начального колебательного квантового числа для реакции  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2^+(X^2\Sigma_u^+) + 2e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}^+ + 2e$

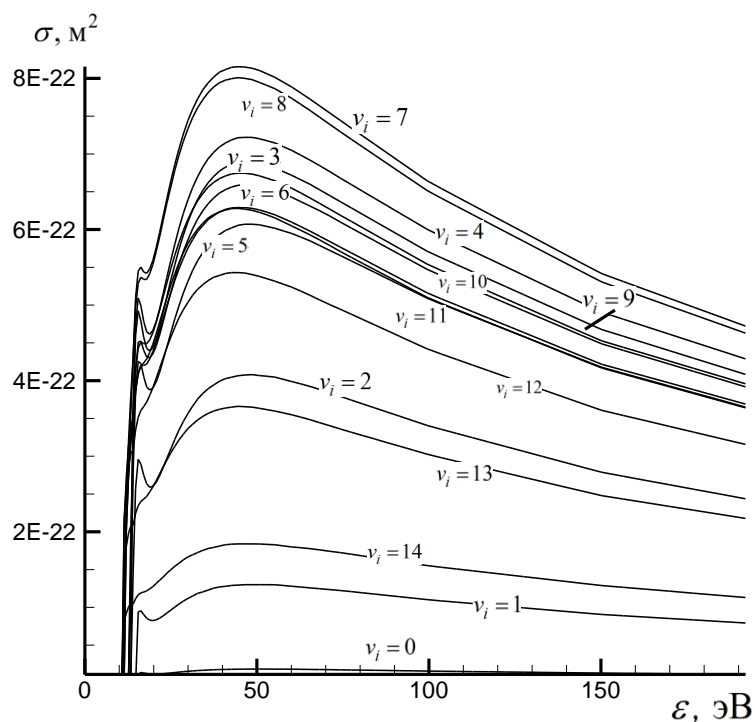


Рис. 8. Сечения рассеяния как функция энергии электрона и начального колебательного квантового числа для реакции  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(B^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}(2l) + e$

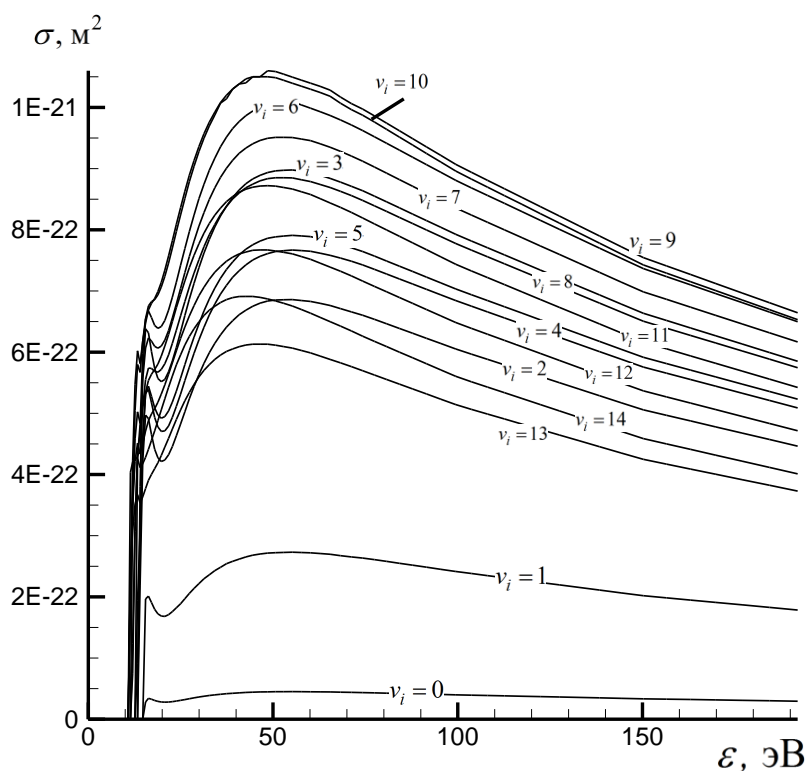


Рис. 9. Сечения рассеяния как функция энергии электрона и начального колебательного квантового числа для реакции  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(C^1\Pi_u^+) + e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}(2l) + e$

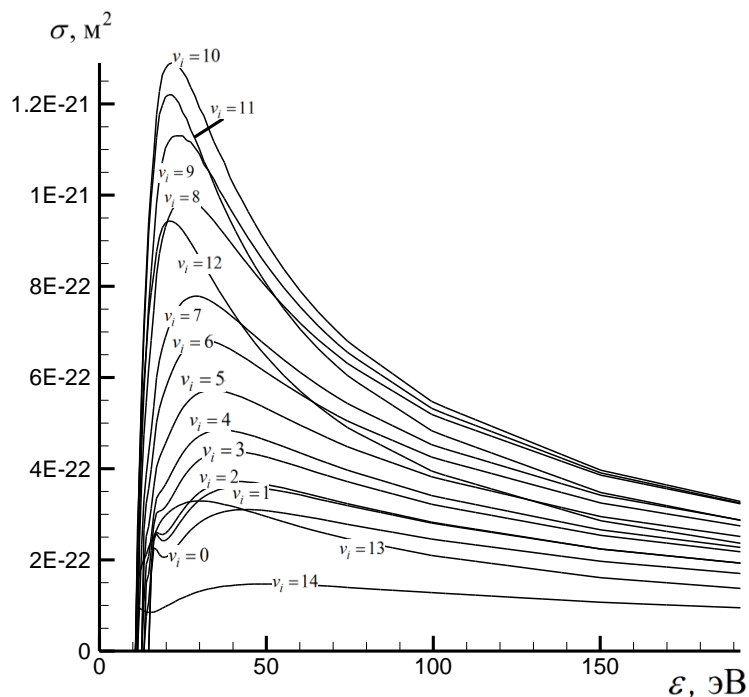


Рис. 10. Сечения рассеяния как функция энергии электрона и начального колебательного квантового числа для реакции  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(B''^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow 2\text{H} + e$

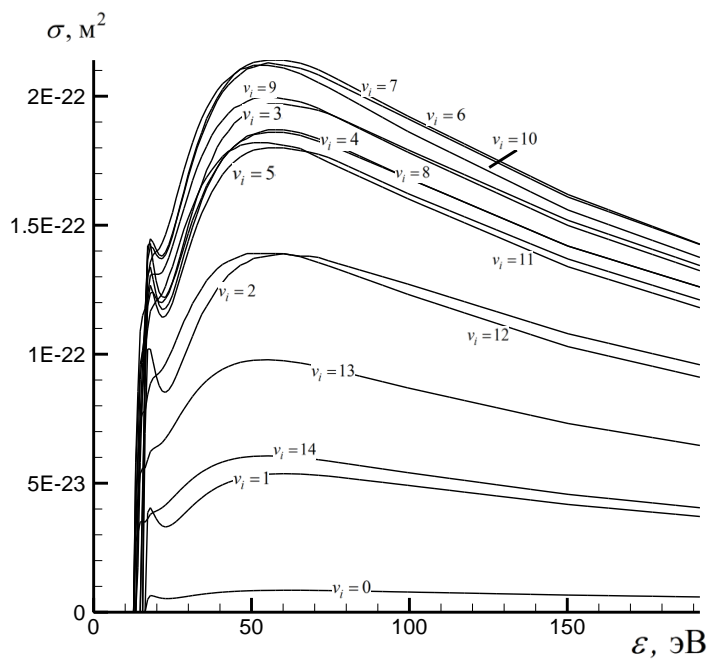


Рис. 11. Сечения рассеяния как функция энергии электрона и начального колебательного квантового числа для реакции  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(D^1\Pi_u) + e \rightarrow 2\text{H} + e$

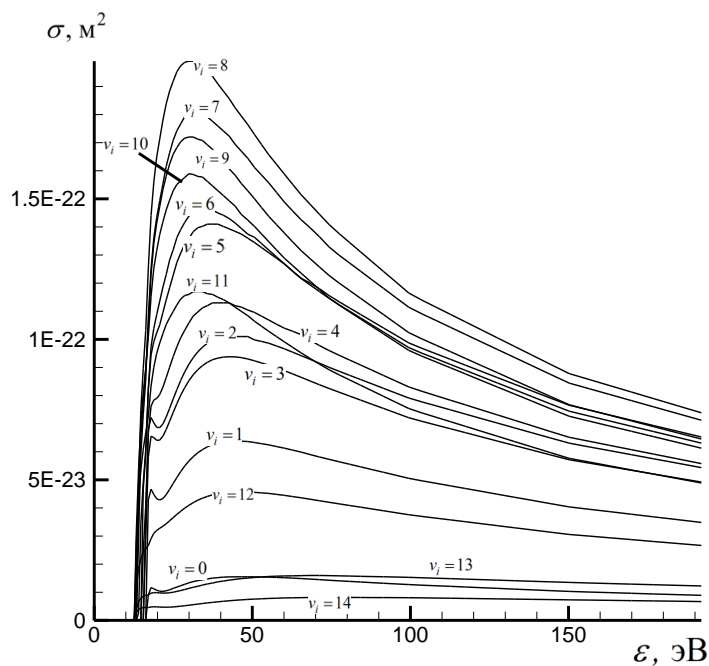


Рис. 12. Сечения рассеяния как функция энергии электрона и начального колебательного квантового числа для реакции  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(B''^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow 2\text{H} + e$

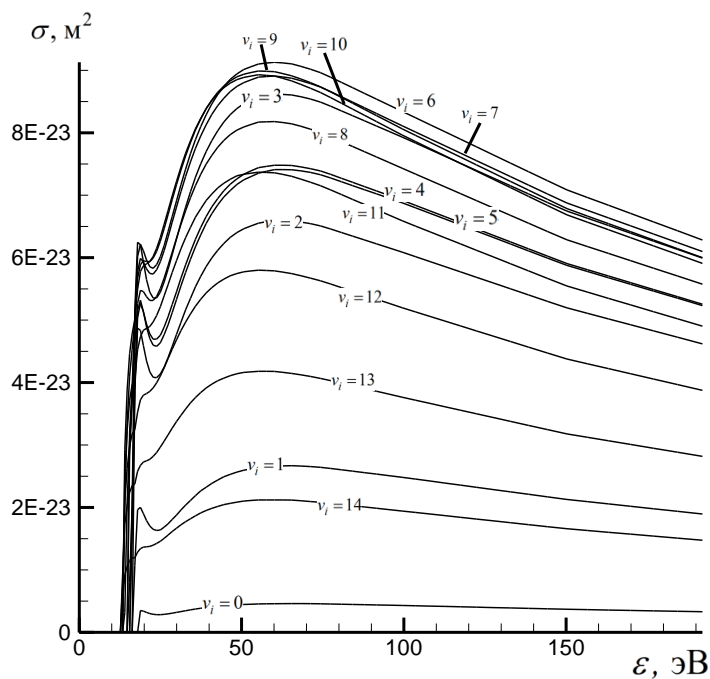


Рис. 13. Сечения рассеяния как функция энергии электрона и начального колебательного квантового числа для реакции  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(D'^1\Pi_u) + e \rightarrow 2\text{H} + e$

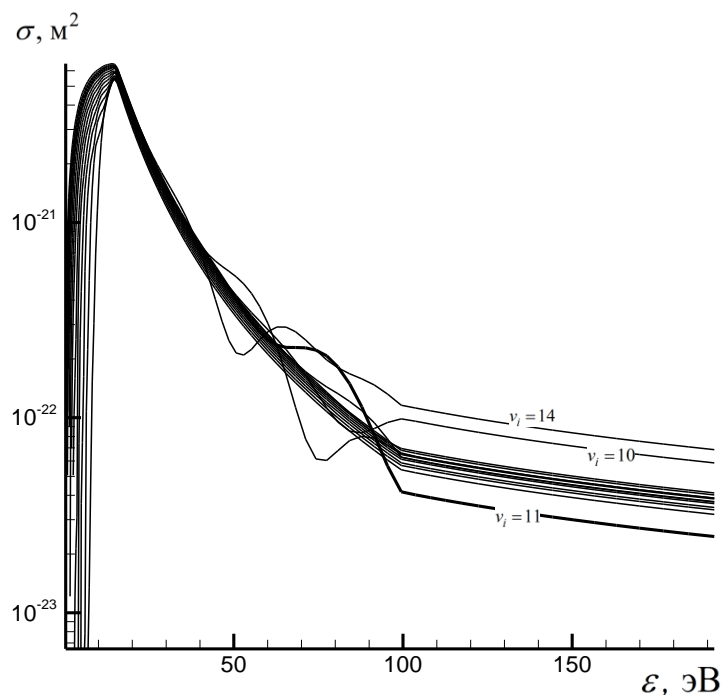


Рис. 14. Сечения рассеяния как функция энергии электрона и начального колебательного квантового числа для реакции  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(b^3\Sigma_u^+) + e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}(1s) + e$

Константы скорости, рассчитанные с использованием Максвелловской и нематвелловской ФРЭЭ (рассчитанной из кинетического уравнения Больцмана) представлены на рис. 15–24.

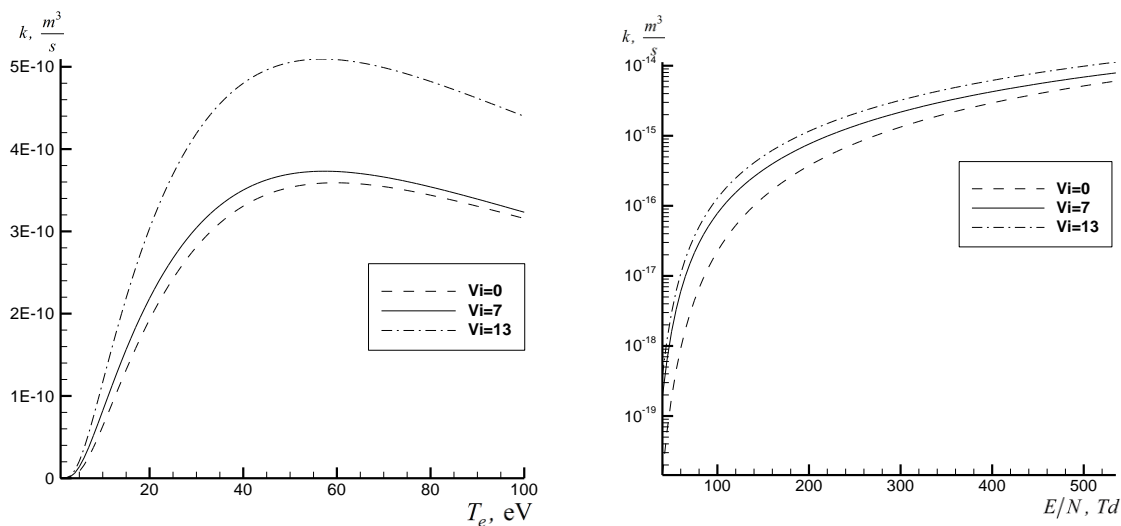


Рис. 15. Зависимость константы скорости от температуры электронов (для максвелловской ФРЭ) и величины приведенного электрического поля (для ФРЭ, рассчитанной из решения кинетического уравнения Больцмана) для различных колебательных квантовых чисел основного электронного состояния молекулы водорода в реакции  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2^+(X^2\Sigma_g^+) + e$

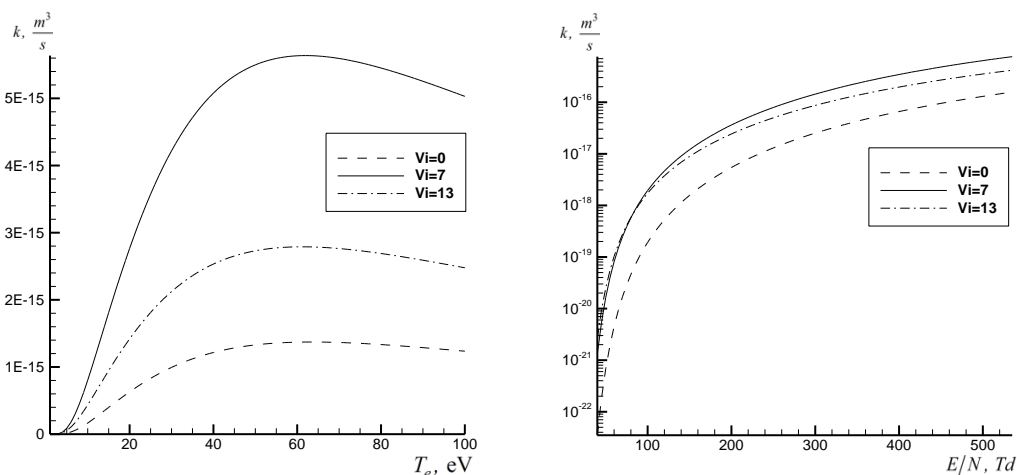


Рис. 16. Зависимость константы скорости от температуры электронов (для максвелловской ФРЭ) и величины приведенного электрического поля (для ФРЭ, рассчитанной из решения кинетического уравнения Больцмана) для различных колебательных квантовых чисел основного электронного состояния молекулы водорода в реакции  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(X^2\Sigma_g^+) + 2e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}^+ + 2e$

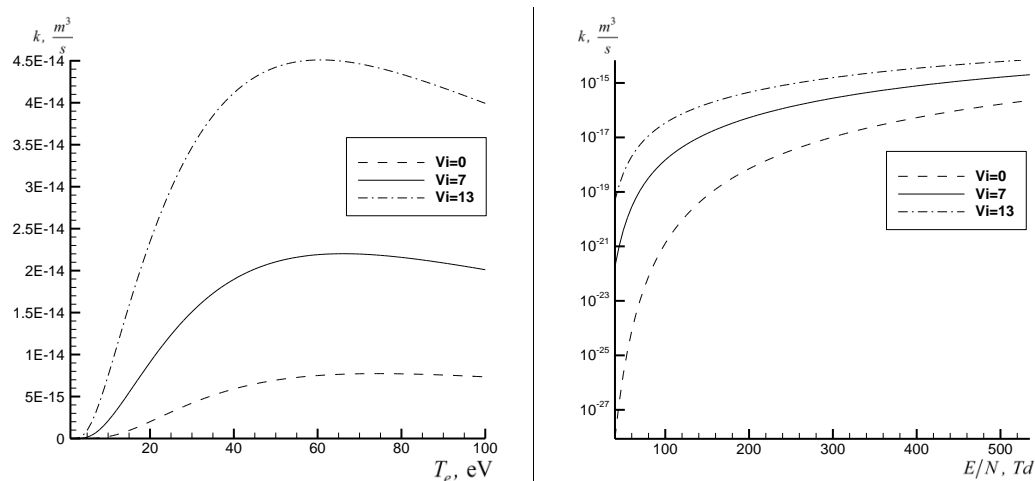


Рис. 17. Зависимость константы скорости от температуры электронов (для максвелловской ФРЭ) и величины приведенного электрического поля (для ФРЭ, рассчитанной из решения кинетического уравнения Больцмана) для различных колебательных квантовых чисел основного электронного состояния молекулы водорода в реакции  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(X^2\Sigma_u^+) + 2e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}^+ + 2e$

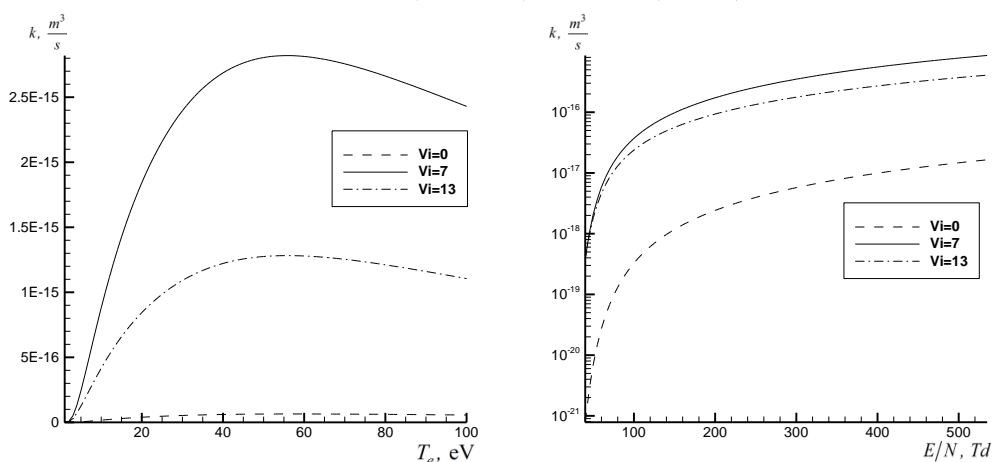


Рис. 18. Зависимость константы скорости от температуры электронов (для максвелловской ФРЭ) и величины приведенного электрического поля (для ФРЭ, рассчитанной из решения кинетического уравнения Больцмана) для различных колебательных квантовых чисел основного электронного состояния молекулы водорода в реакции  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(B^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}(2l) + e$



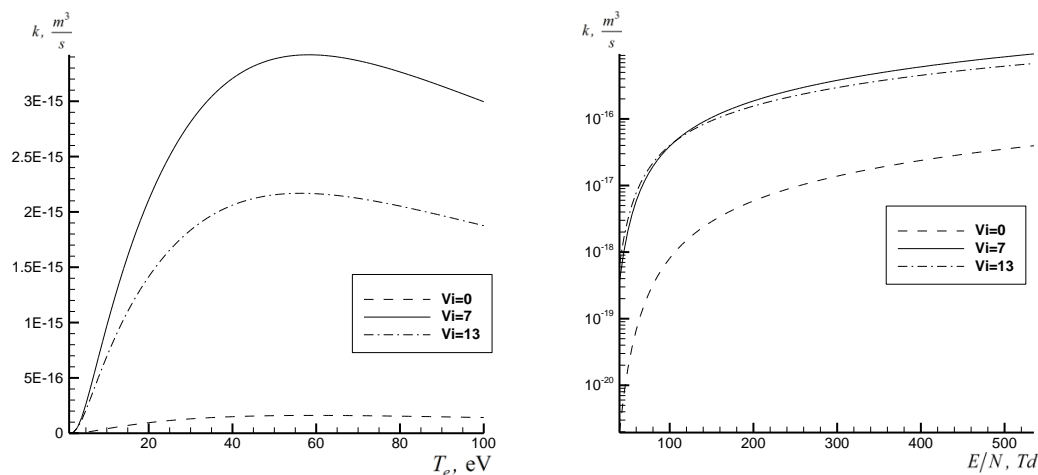


Рис. 19. Зависимость константы скорости от температуры электронов (для максвелловской ФРЭ) и величины приведенного электрического поля (для ФРЭ, рассчитанной из решения кинетического уравнения Больцмана) для различных колебательных квантовых чисел основного электронного состояния молекулы водорода в реакции  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(C^1\Pi_u^+) + e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}(2l) + e$

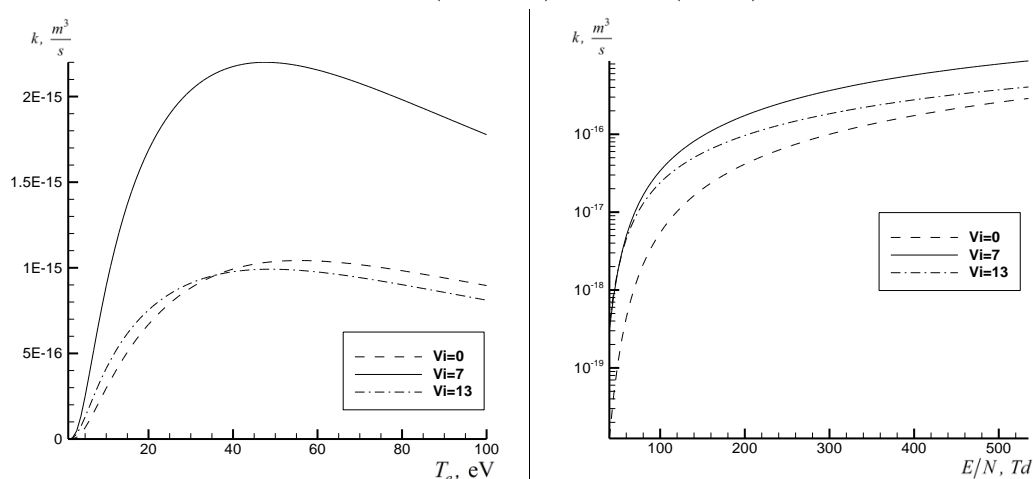


Рис. 20. Зависимость константы скорости от температуры электронов (для максвелловской ФРЭ) и величины приведенного электрического поля (для ФРЭ, рассчитанной из решения кинетического уравнения Больцмана) для различных колебательных квантовых чисел основного электронного состояния молекулы водорода в реакции  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(B^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow 2\text{H} + e$

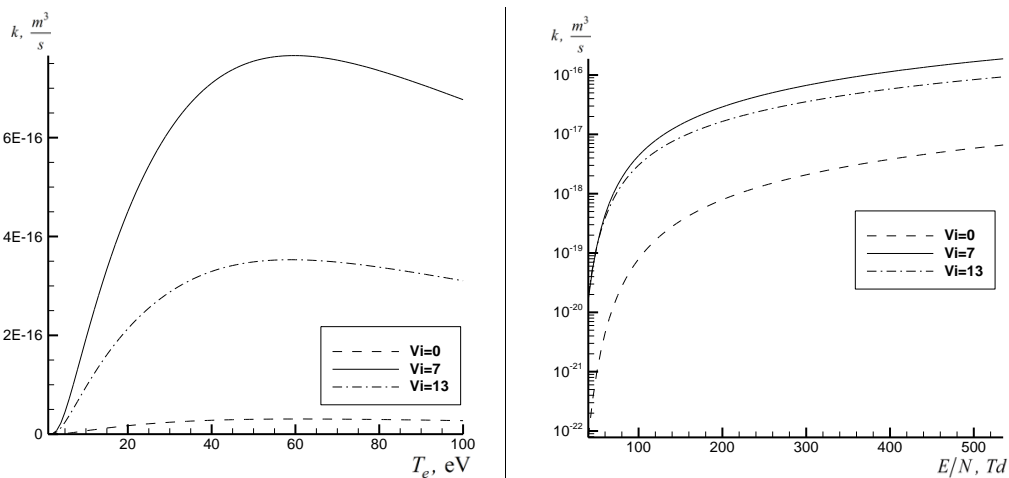


Рис. 21. Зависимость константы скорости от температуры электронов (для максвелловской ФРЭ) и величины приведенного электрического поля (для ФРЭ, рассчитанной из решения кинетического уравнения Больцмана) для различных колебательных квантовых чисел основного электронного состояния молекулы водорода в реакции  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(D^1\Pi_u) + e \rightarrow 2\text{H} + e$

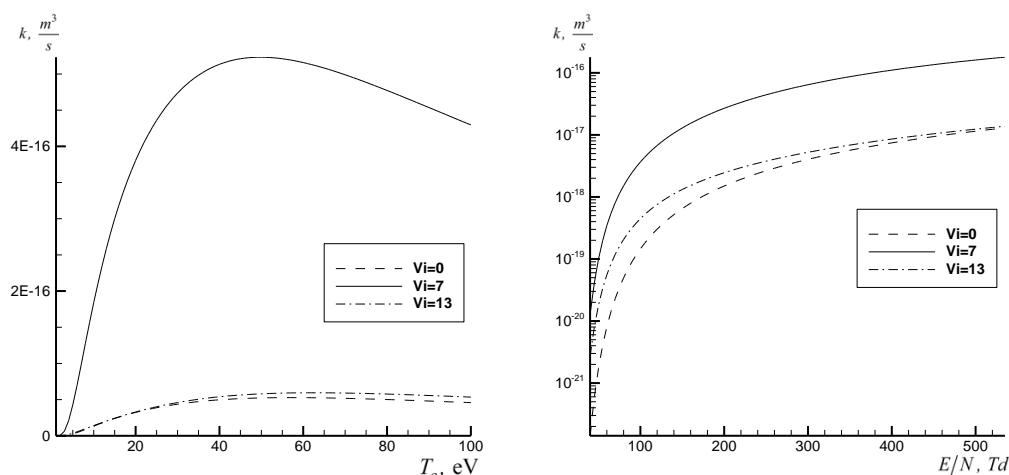


Рис. 22. Зависимость константы скорости от температуры электронов (для максвелловской ФРЭ) и величины приведенного электрического поля (для ФРЭ, рассчитанной из решения кинетического уравнения Больцмана) для различных колебательных квантовых чисел основного электронного состояния молекулы водорода в реакции  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(B''^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow 2\text{H} + e$

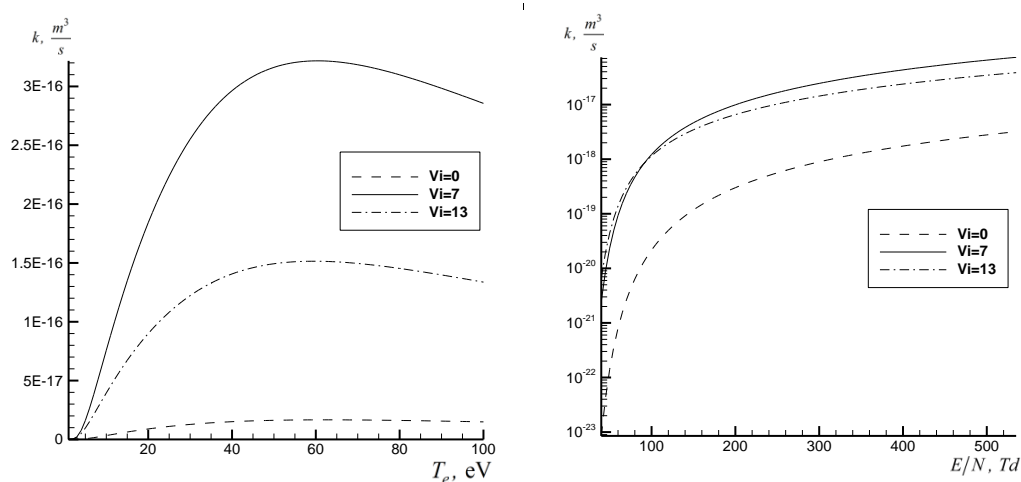


Рис. 23. Зависимость константы скорости от температуры электронов (для максвелловской ФРЭ) и величины приведенного электрического поля (для ФРЭ, рассчитанной из решения кинетического уравнения Больцмана) для различных колебательных квантовых чисел основного электронного состояния молекулы водорода в реакции  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(D^1\Pi_u) + e \rightarrow 2\text{H} + e$

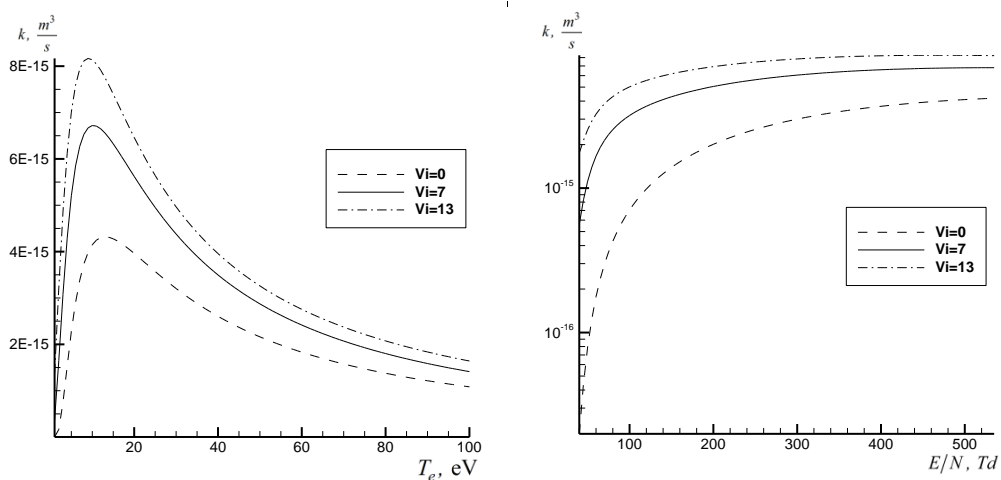


Рис. 24. Зависимость константы скорости от температуры электронов (для максвелловской ФРЭ) и величины приведенного электрического поля (для ФРЭ, рассчитанной из решения кинетического уравнения Больцмана) для различных колебательных квантовых чисел основного электронного состояния молекулы водорода в реакции  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(b^3\Sigma_u^+) + e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}(1s) + e$

## 7. Результаты численного моделирования

Результаты численного моделирования двумерной структуры тлеющего разряда при давлениях  $p = 3$  и  $p = 10$  Торр приведены на рис. 25–28 и 29–32. При увеличении давления радиальные размеры положительного столба тлеющего разряда сильно увеличиваются. Также растет плотность тока и концентрация заряженных частиц на оси симметрии тлеющего разряда.

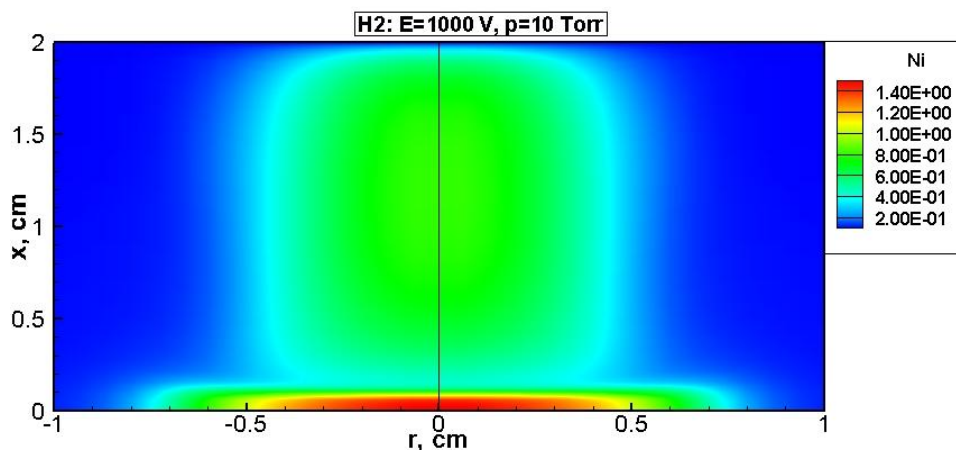


Рис. 25. Пространственные распределения концентрации ионов  $p = 10$  Торр,  $E = 1$  кВ,  $\gamma = 0.33$ ,  $H = 2$  см

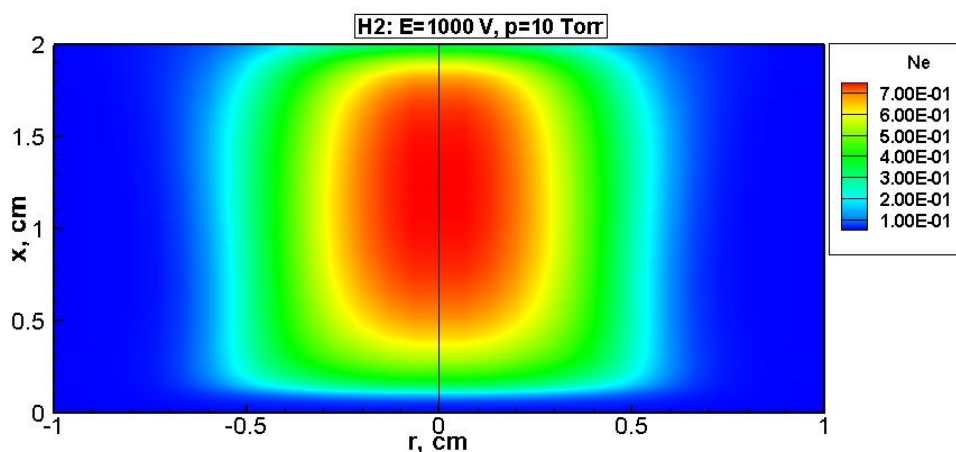


Рис. 26. Пространственные распределения концентрации электронов  $p = 10$  Торр,  $E = 1$  кВ,  $\gamma = 0.33$ ,  $H = 2$  см.

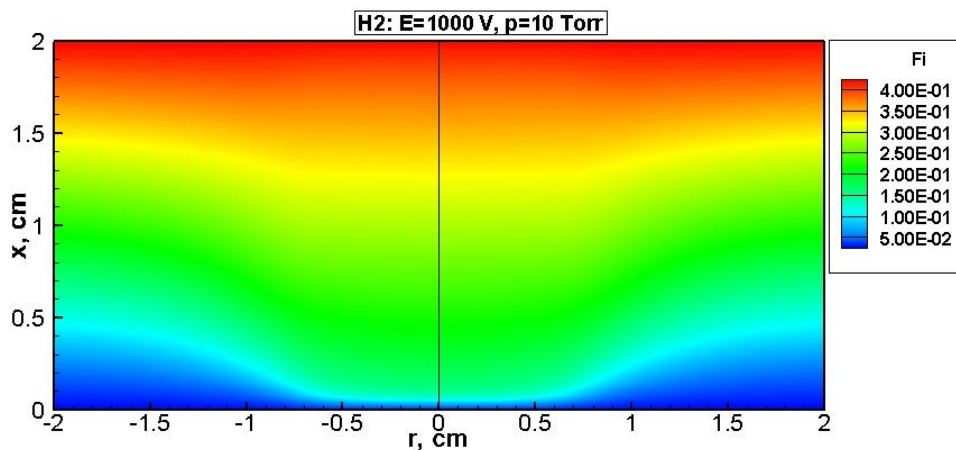


Рис. 27. Пространственное распределение электрического потенциала  $p = 10$  Торр,  $E = 1$  кВ,  $\gamma = 0.33$ ,  $H = 2$  см

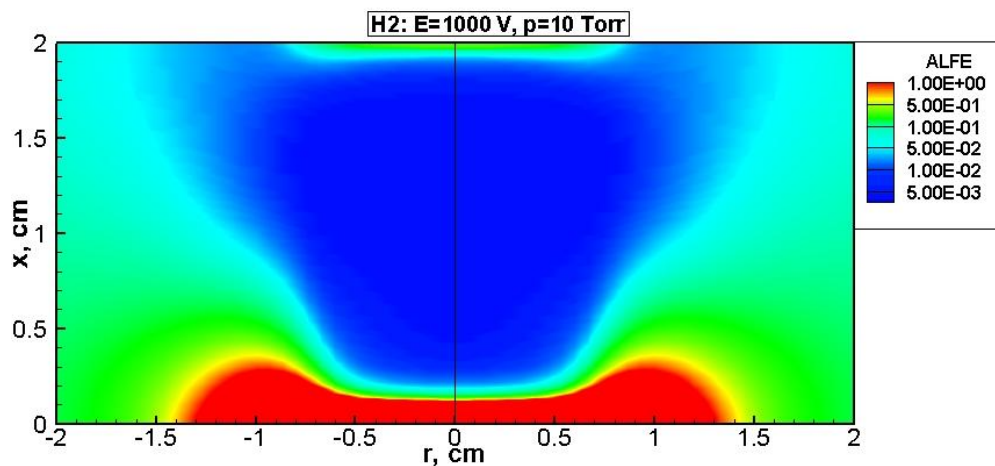


Рис. 28. Пространственное распределение коэффициента ионизации  $p=10$ Торр,  $E=1$ кВ,  $\gamma=0.33$ ,  $H=2$  см

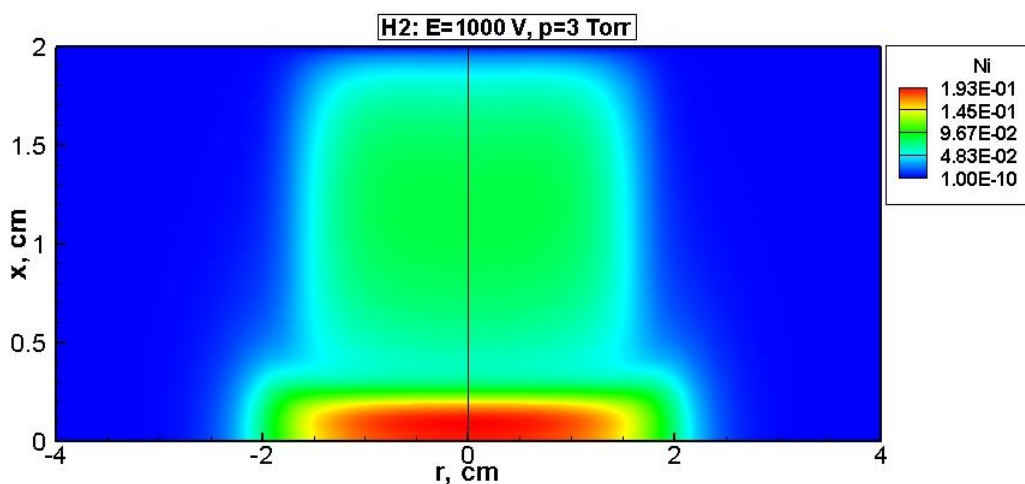


Рис. 29. Пространственные распределения концентрации ионов  $p=3$ Торр,  $E=1$ кВ,  $\gamma=0.33$ ,  $H=2$  см

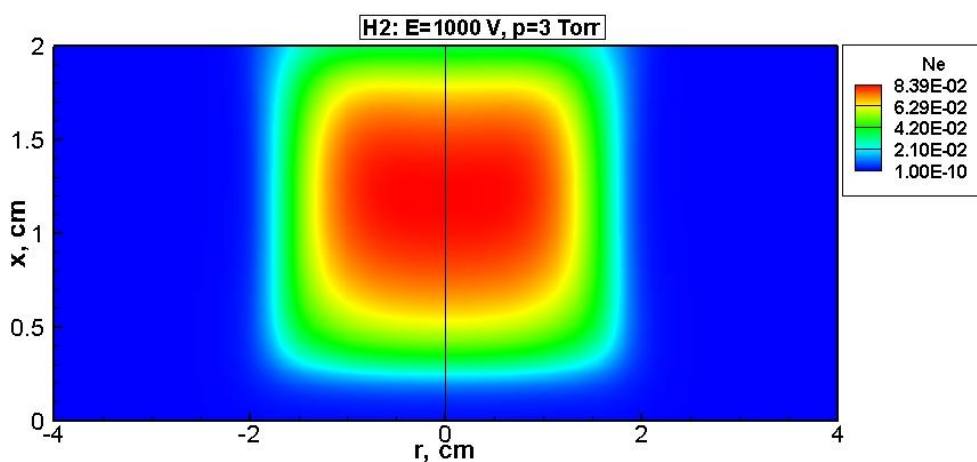


Рис. 30. Пространственные распределения концентрации электронов  $p=3$ Торр,  $E=1$ кВ,  $\gamma=0.33$ ,  $H=2$  см

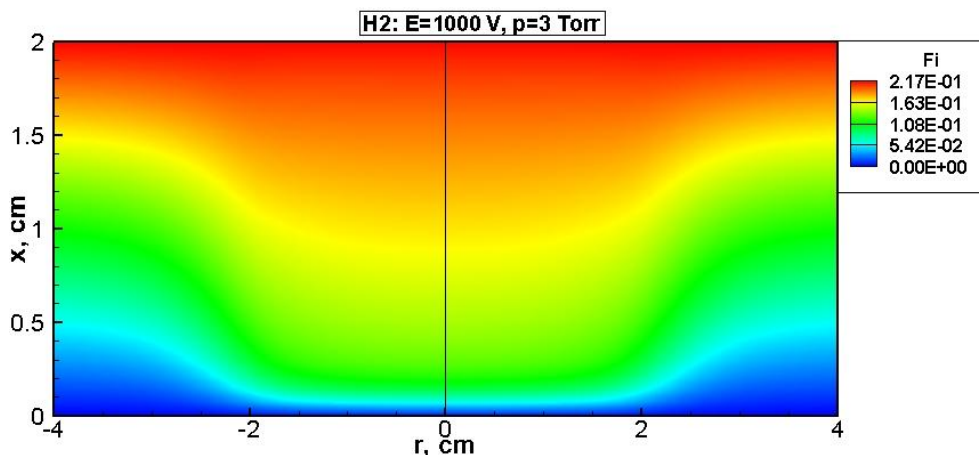


Рис. 31. Пространственное распределение электрического потенциала  $p=3\text{Torr}$ ,  $E=1\text{kB}$ ,  $\gamma=0.33$ ,  $H=2\text{ см}$

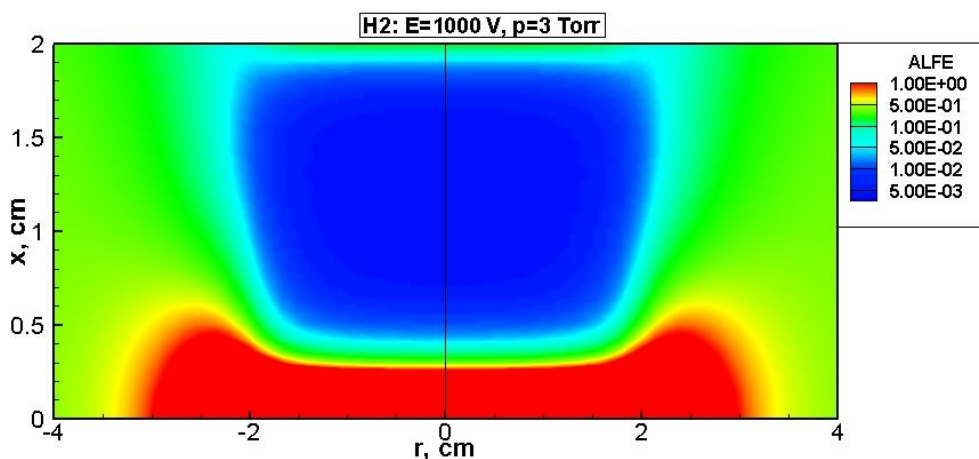


Рис. 32. Пространственное распределение коэффициента ионизации  $p=3\text{Torr}$ ,  $E=1\text{kB}$ ,  $\gamma=0.33$ ,  $H=2\text{ см}$

На рис. 33–35 представлены результаты расчета 1го коэффициента Таунсенда (коэффициент ионизации), коэффициента диффузии рассчитанных на основе решения кинетического уравнения Больцмана, а также дано колебательное распределение молекул водорода в положительном столбе тлеющего разряда.

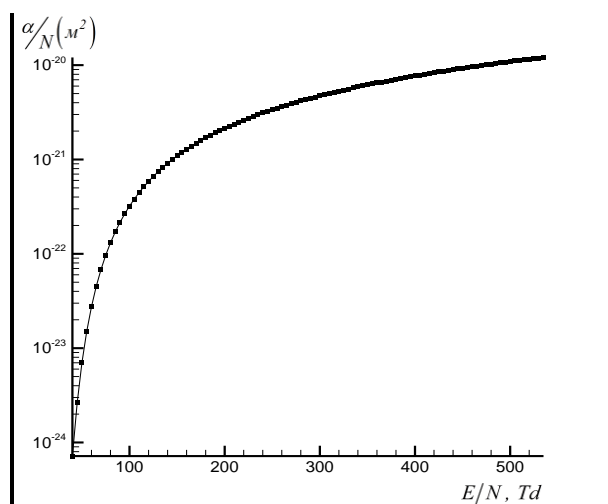


Рис. 33. Зависимость величины 1го коэффициента таунсенда от приведенного электрического поля

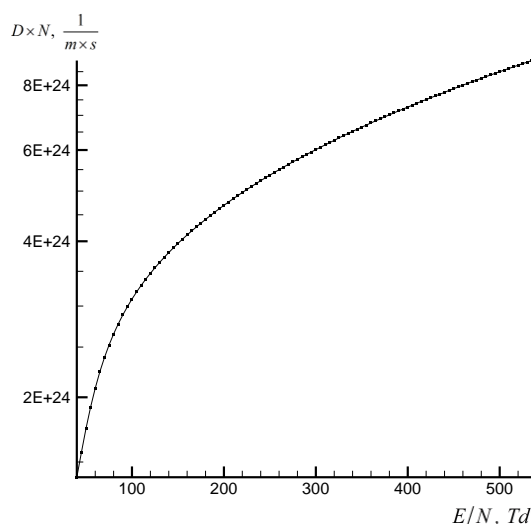
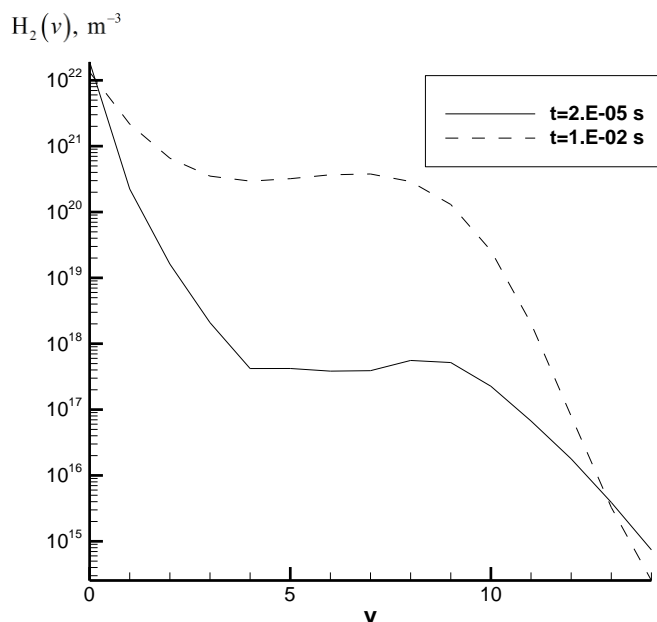


Рис. 34. Зависимость коэффициента диффузии от приведенного электрического поля


 Рис. 35. Колебательная функция распределения основного электронного  $X^1\Sigma_g^+$  состояния молекулы  $H_2$  в моменты времени  $t = 2E-05$  с и  $t = 1E-02$  с

На рисунках видно, что коэффициент ионизации на несколько порядков выше в области катодного слоя, по сравнению с положительным столбом тлеющего разряда. Функция распределения электронов по энергиям является немаквелловской, а распределение молекул по колебательным состояниям не больцмановское. Пространственное распределение кинетических параметров плазмы, рассчитанных с использованием решения кинетического уравнения Больцмана, а также распределение химических компонент плазмы даны на рис. 36–44.

Осевые распределения этих величин даны на рис. 45–48. На данных рисунках показано, что степень диссоциации равна  $\delta_{ioniz} = 10^{-7} \div 10^{-6}$  в положительном столбе тлеющего разряда и  $\delta_{ioniz} = 10^{-4}$  катодном слое. Основным ионом в плазме является  $H_2^+$ . Степень диссоциации равна  $\delta_{dissoc} \approx 10^{-3}$ . Концентрация колебательно возбужденных молекул с колебательным квантовым числом ( $v \geq 5$ ) на порядок выше, чем концентрация в положительном столбе (рис. 46).

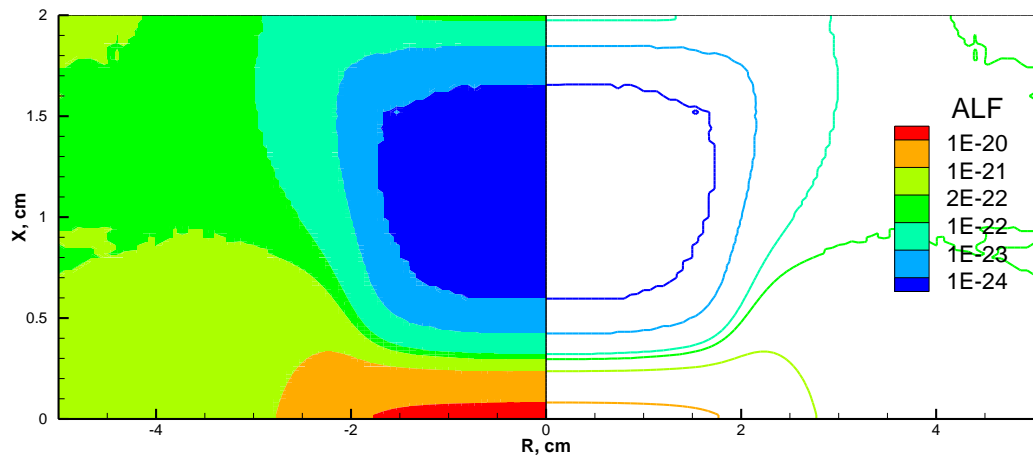


Рис. 36. Пространственное распределение 1го коэффициента Таунседа ( $\alpha/N$ ) в  $\text{м}^2$

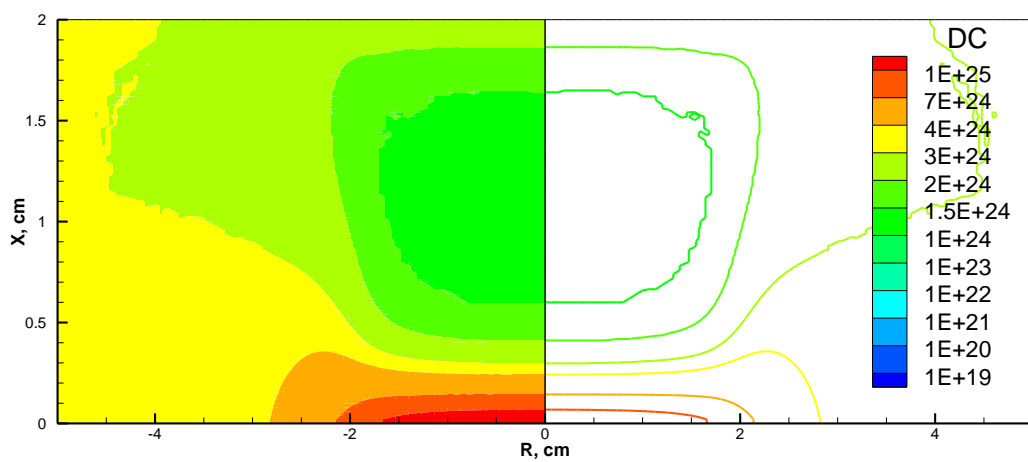


Рис. 37. Пространственное распределение коэффициента диффузии ( $D \times N$ ,  $1/\text{м} \times \text{с}$ )

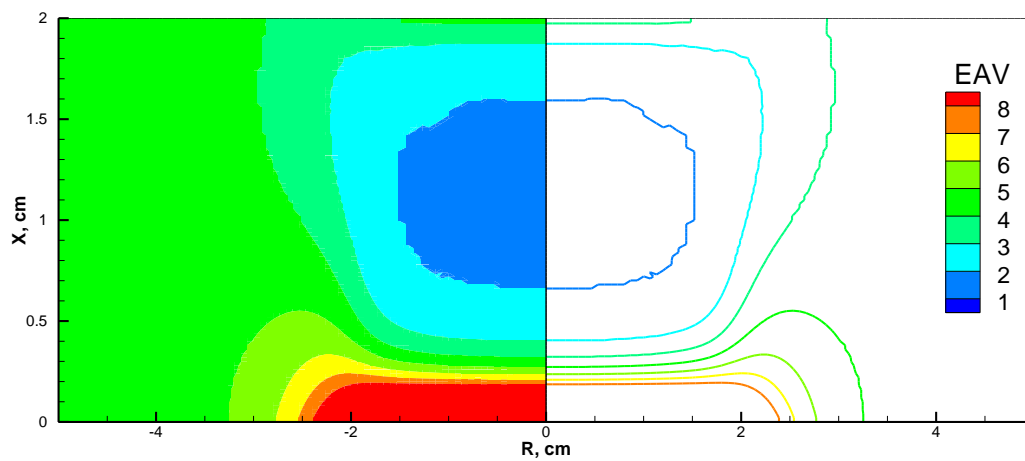


Рис. 38. Пространственное распределение средней энергии электронов (eV)

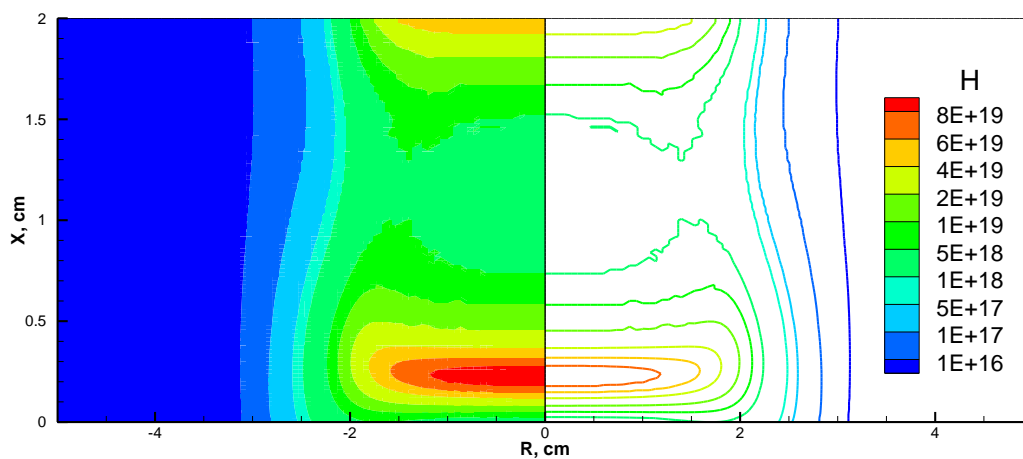


Рис. 39. Пространственное распределение концентрации нейтральных атомов H ( $\text{m}^{-3}$ )

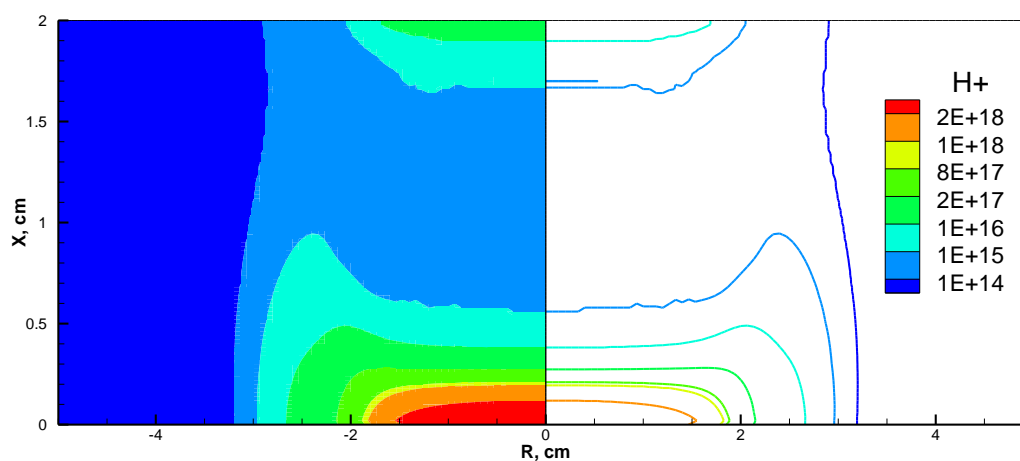


Рис. 40. Пространственное распределение атомарных ионов H<sup>+</sup> ( $\text{m}^{-3}$ )

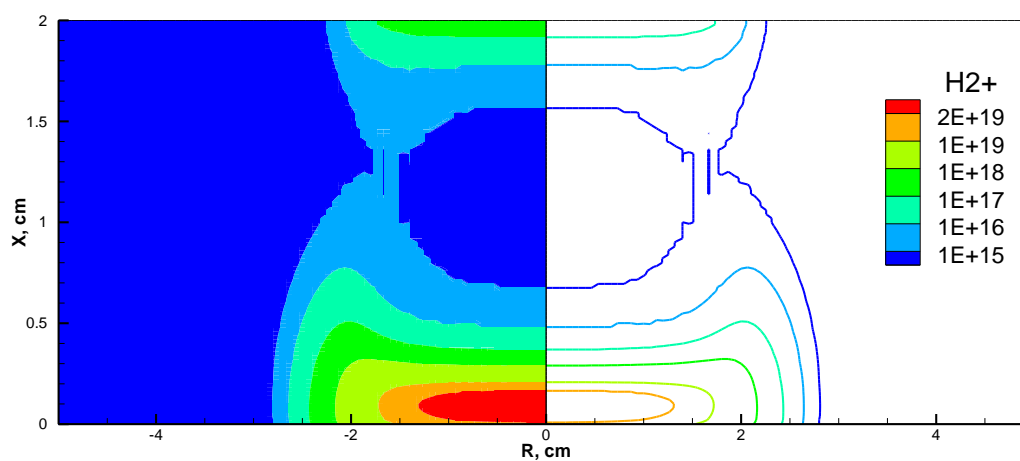


Рис. 41. Пространственное распределение молекулярных ионов H<sub>2</sub><sup>+</sup> ( $\text{m}^{-3}$ )



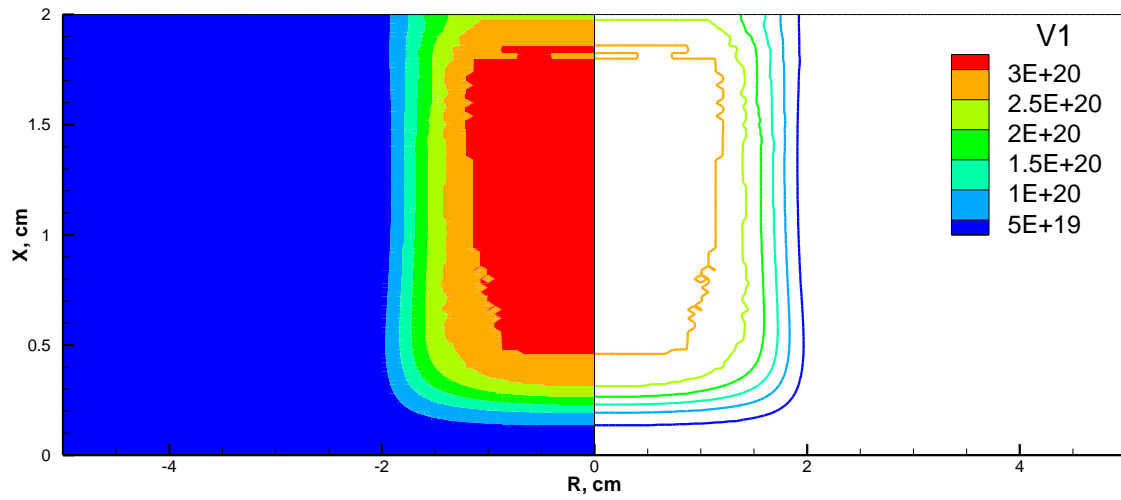


Рис. 42. Пространственное распределение колебательно возбужденных молекул H<sub>2</sub> для  $\nu=1$  (м<sup>-3</sup>)

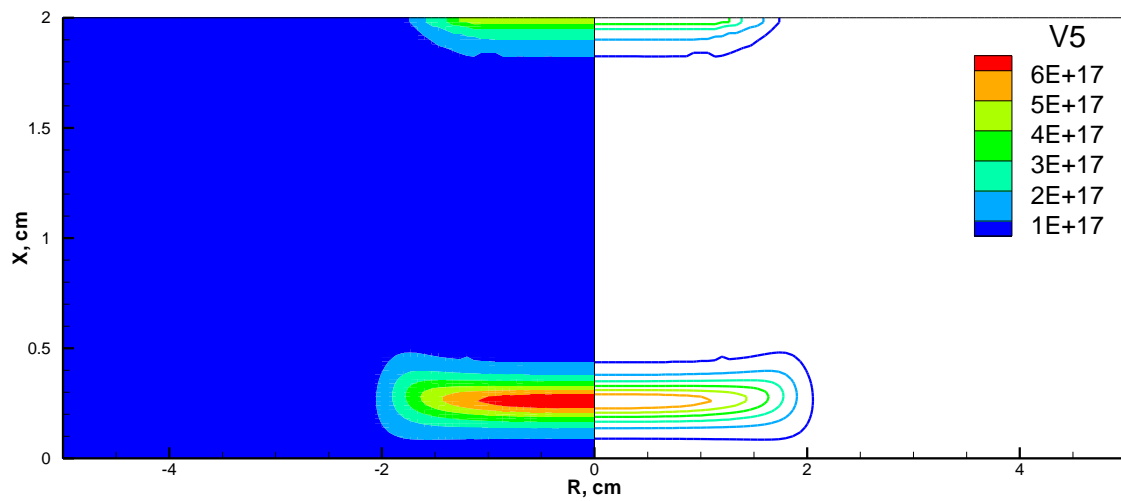


Рис. 43. Пространственное распределение колебательно возбужденных молекул H<sub>2</sub> для  $\nu=5$  (м<sup>-3</sup>).

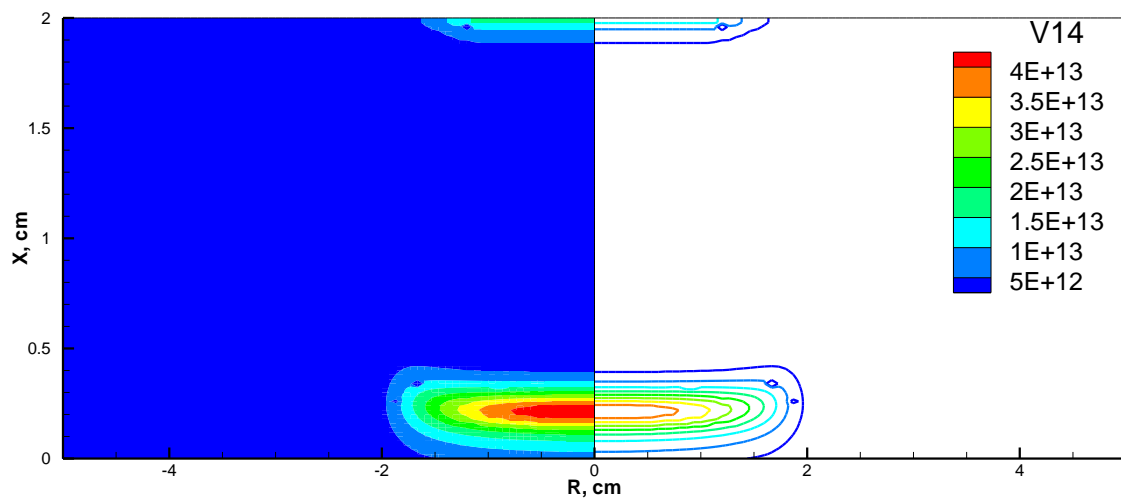


Рис. 44. Пространственное распределение колебательно возбужденных молекул H<sub>2</sub> для  $\nu=14$  (м<sup>-3</sup>).

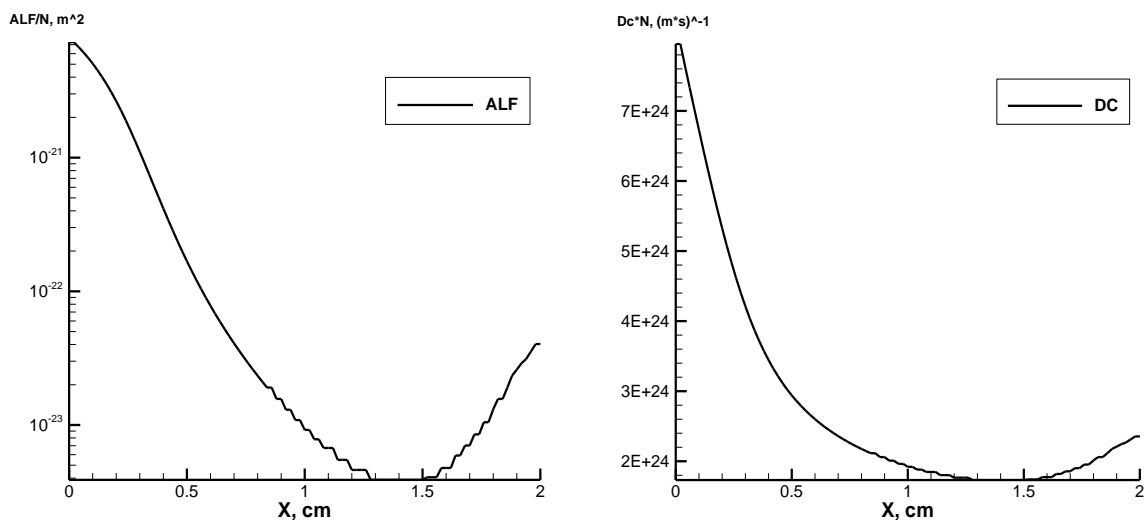


Рис. 45. Осевые распределения значений 1го коэффициента Таунсенда и коэффициента диффузии

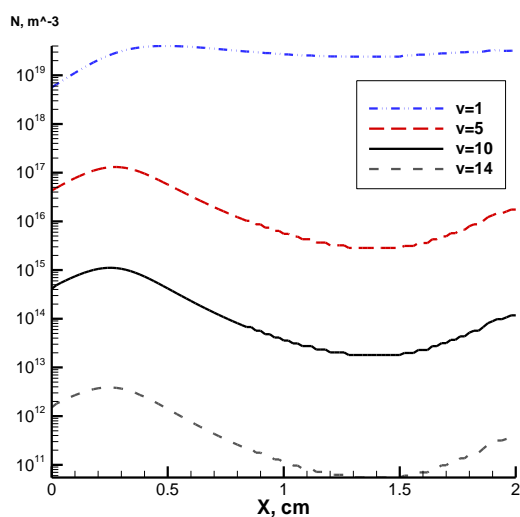


Рис. 46. Осевые распределения колебательно возбужденных молекул газа для  $v=1, 5, 10, 14$

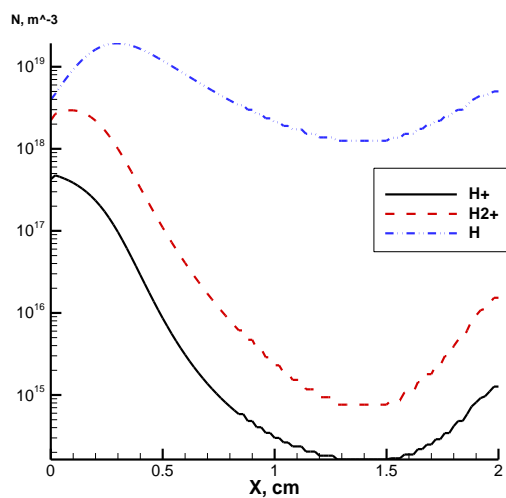


Рис. 47. Осевые распределения молекулярных и атомарных ионов, нейтральных атомов

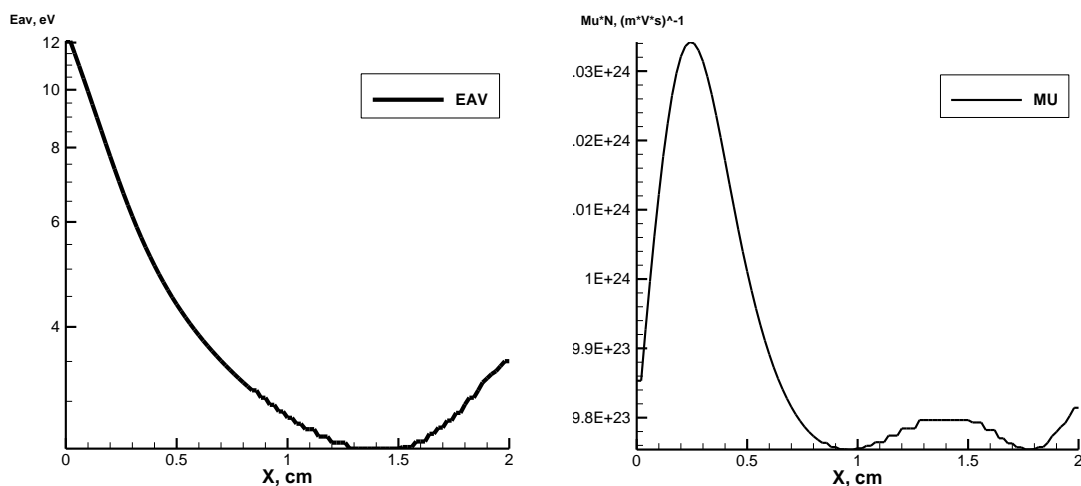


Рис. 48. Осевые распределения средней энергии электронов и их подвижности

На рис. 49–65 показано влияние различных механизмов, рассматриваемых в работе на образование нейтральных атомов Н, атомарных  $\text{H}^+$  и молекулярных  $\text{H}_2^+$  ионов. Данные рисунки также иллюстрируют влияние колебательного возбуждения молекул на образование данных компонент. Результаты численного моделирования, приведенные на данных графиках, получены для значений приведенного электрического поля, характерных для положительного столба тлеющего разряда ( $E/N \approx 70 \text{ Td}$ ). Основным механизмом образования молекулярного иона  $\text{H}_2^+$  является ионизация электронным ударом. Рисунок 49 иллюстрирует, что 85 % всех молекулярных ионов в плазме тлеющего разряда образовались из основного колебательного состояния, 9 % с 1го возбужденного и 6 % с более высоких колебательных уровней. Влияние различных механизмов на образование атомарных ионов показано на рис. 50. На диаграмме видно, что основным механизмом образования атомарных ионов является ионизация нейтрального атома электронным ударом. Основным процессом, ответственным за образование нейтральных атомов водорода, является диссоциация молекулы электронным ударом, протекающая через возбуждение электронного уровня  $b^3\Sigma_u^+$  (рис. 53). Стоит также отметить, что 18 % нейтральных атомов, образуется в реакциях с колебательно-возбужденными молекулами водорода (рис. 62). На рис. 63–65 также представлено влияние различных механизмов рекомбинации на компонентный состав плазмы тлеющего разряда. Основной процесс (рис. 63), ответственный за рекомбинацию молекулярных ионов  $\text{H}_2^+$  диссоциативная ионизация  $e + \text{H}_2^+ \rightarrow \text{H}(1) + \text{H}(n)$ . Главный механизм, ответственный за уход нейтральных атомов Н рекомбинация в тройных столкновениях  $\text{H} + \text{H} + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2(X, v=14) + \text{H}_2$ .

## 8. Заключение

Данная работа отвечает направлению численного моделирования газодинамических энергетических установок, развиваемому в рамках научной программы лаборатории радиационной газовой динамики ИПМех РАН [14–23]. В работе было выполнено численное моделирование двухмерной структуры тлеющего разряда. Выполнены расчеты пространственного распределения концентраций электронов и ионов, компонентного состава плазмы. Приводится подробный анализ механизмов образования нейтральных атомов и атомарных ионов в тлеющем разряде. Получены численные результаты по концентрациям молекулярных и атомарных ионов.

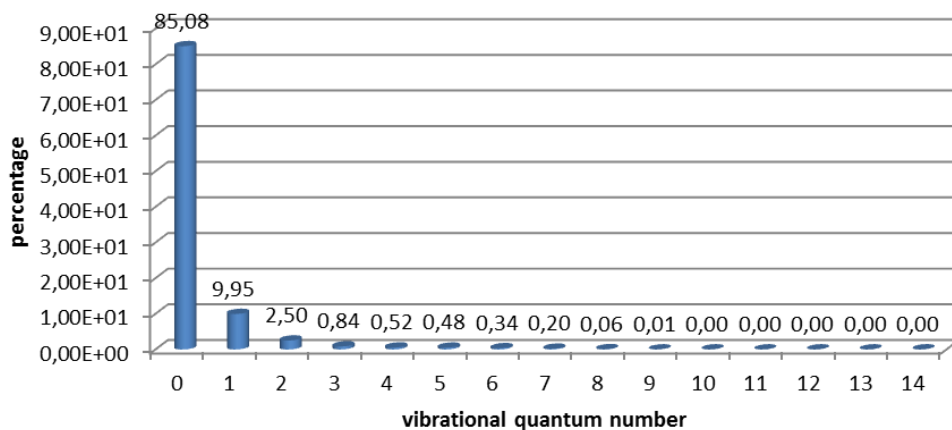


Рис. 49. Относительная доля молекулярных ионов  $H_2^+(X^2\Sigma_g^+)$  образовавшихся из различных колебательно возбужденных молекул в реакции  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2^+(X^2\Sigma_g^+) + e$

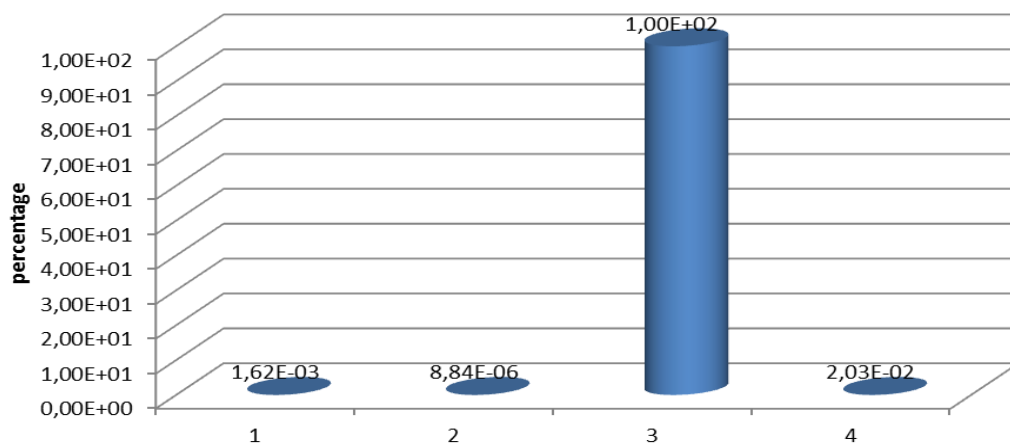


Рис. 50. Доля атомарных ионов, образовавшихся за счет реакций:

1.  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2^+(X^2\Sigma_g^+) + 2e \rightarrow H(1s) + H^+ + 2e$
2.  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2^+(^2\Sigma_u^+) + 2e \rightarrow H(1s) + H^+ + 2e$
3.  $H + e \rightarrow H^+ + e + e$
4.  $H_2^+ + H \rightarrow H_2 + H^+$

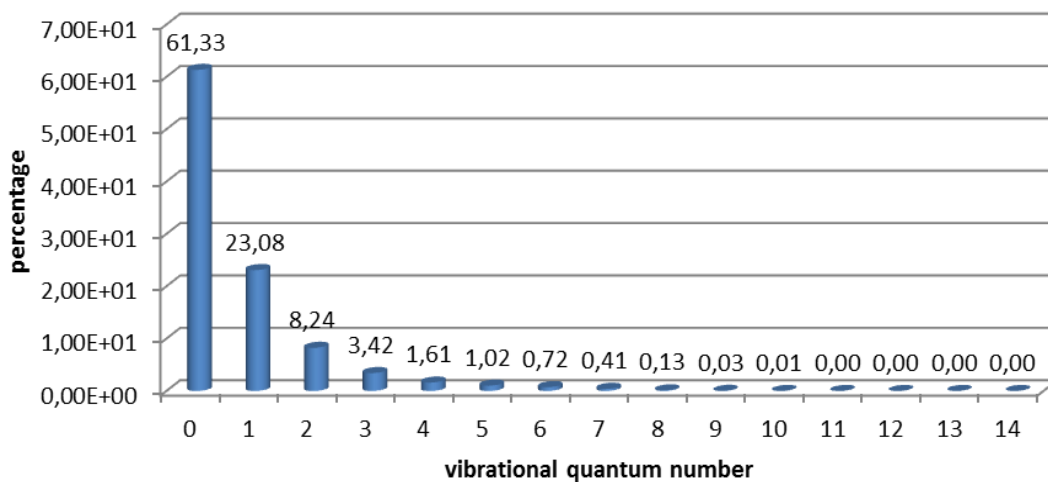


Рис. 51. Доля атомарных ионов  $H^+$  образовавшихся из разных колебательных состояний в реакции  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2^+(X^2\Sigma_g^+) + 2e \rightarrow H(1s) + H^+ + 2e$

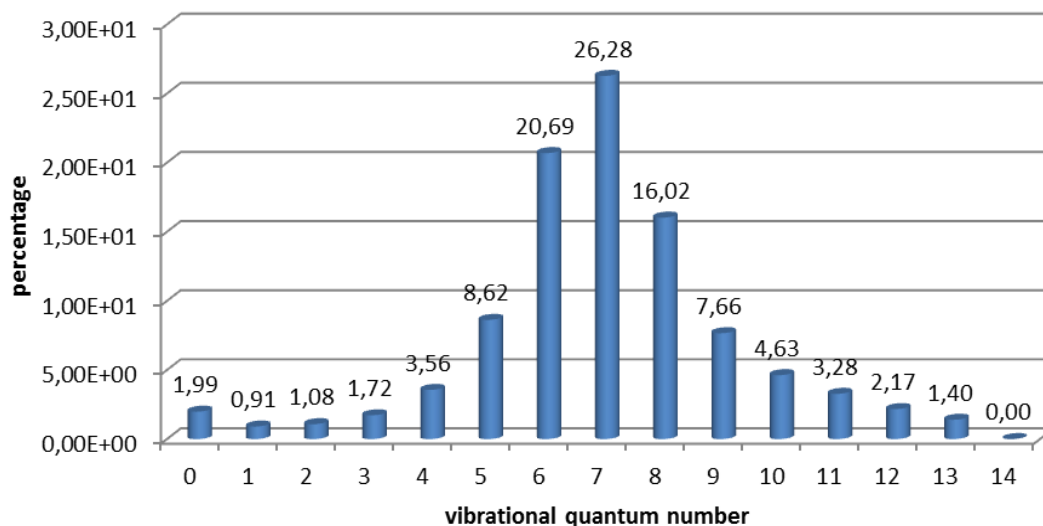


Рис. 52. Доля атомарных ионов  $H^+$  образовавшихся из разных колебательных состояний в реакции  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2^+(\Sigma_u^+) + 2e \rightarrow H(1s) + H^+ + 2e$

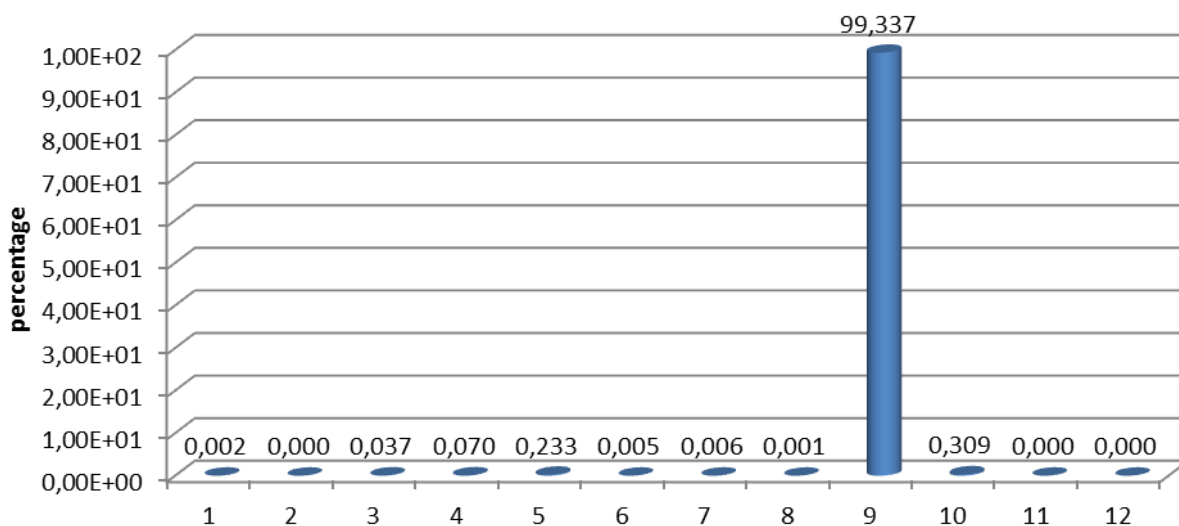


Рис. 53. Доля нейтральных атомов  $H$  образовавшихся в реакциях:

1.  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2^+(X^2\Sigma_g^+) + 2e \rightarrow H(1s) + H^+ + 2e$
2.  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2^+(\Sigma_u^+) + 2e \rightarrow H(1s) + H^+ + 2e$
3.  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow H(1s) + H(2l) + e$
4.  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(C^1\Pi_u^+) + e \rightarrow H(1s) + H(2l) + e$
5.  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(B''^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow 2H + e$
6.  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(D^1\Pi_u) + e \rightarrow 2H + e$
7.  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(B''^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow 2H + e$
8.  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(D^1\Pi_u) + e \rightarrow 2H + e$
9.  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(b^3\Sigma_u^+) + e \rightarrow H(1s) + H(1s) + e$
10.  $e + H_2^+ \rightarrow H(1) + H(n)$
11.  $e + e + H^+ \rightarrow e + H(n)$
12.  $e + H^+ \rightarrow H + h\nu$

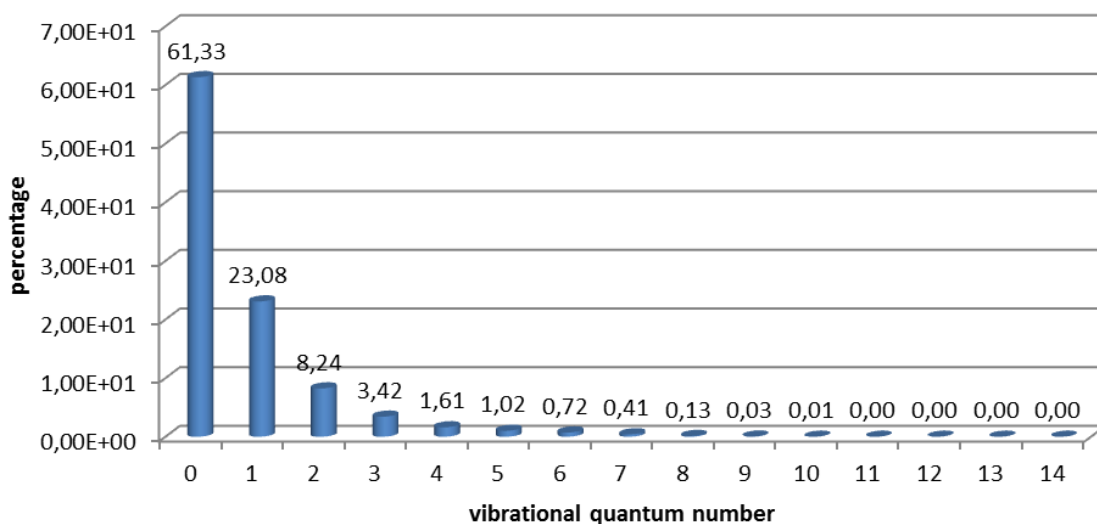


Рис. 54. Доля атомарных ионов Н образовавшихся из разных колебательных состояний в реакции  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(X^2\Sigma_g^+) + 2e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}^+ + 2e$

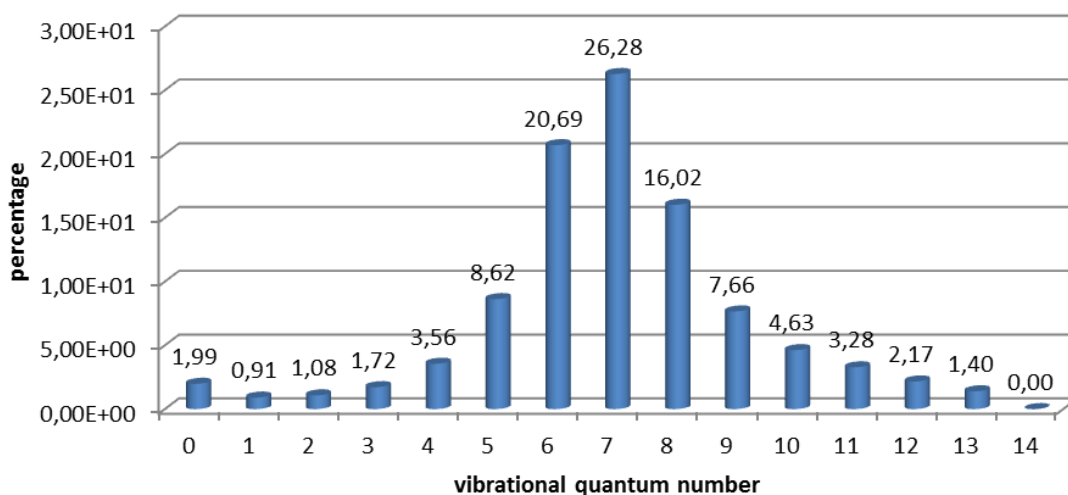


Рис. 55. Доля атомарных ионов Н образовавшихся из разных колебательных состояний в реакции  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(2^2\Sigma_u^+) + 2e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}^+ + 2e$

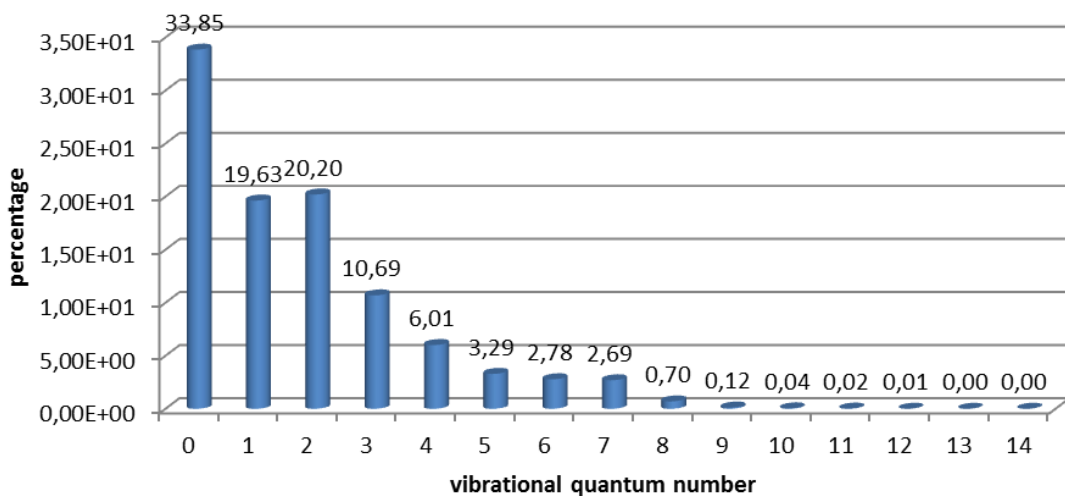


Рис. 56. Доля атомарных ионов Н образовавшихся из разных колебательных состояний в реакции  $\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow \text{H}_2(B^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow \text{H}(1s) + \text{H}(2l) + e$

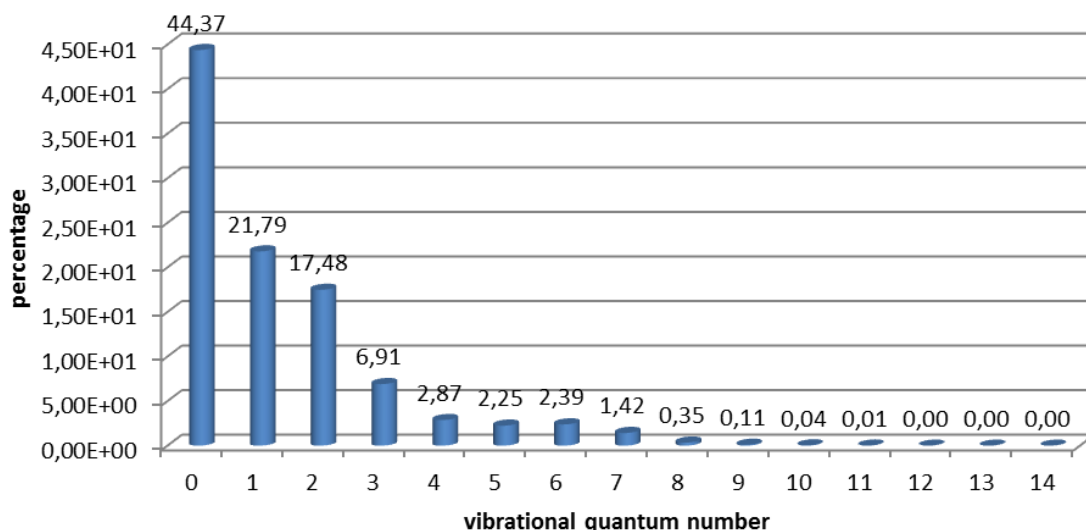


Рис. 57. Доля атомарных ионов Н образовавшихся из разных колебательных состояний в реакции  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(C^1\Pi_u^+) + e \rightarrow H(1s) + H(2l) + e$

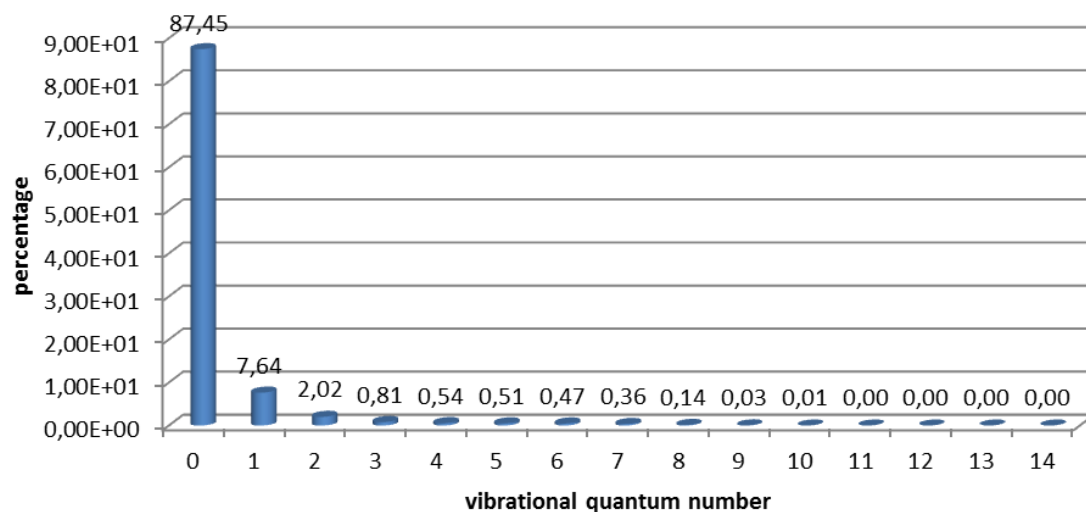


Рис. 58. Доля атомарных ионов Н образовавшихся из разных колебательных состояний в реакции  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(B^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow 2H + e$

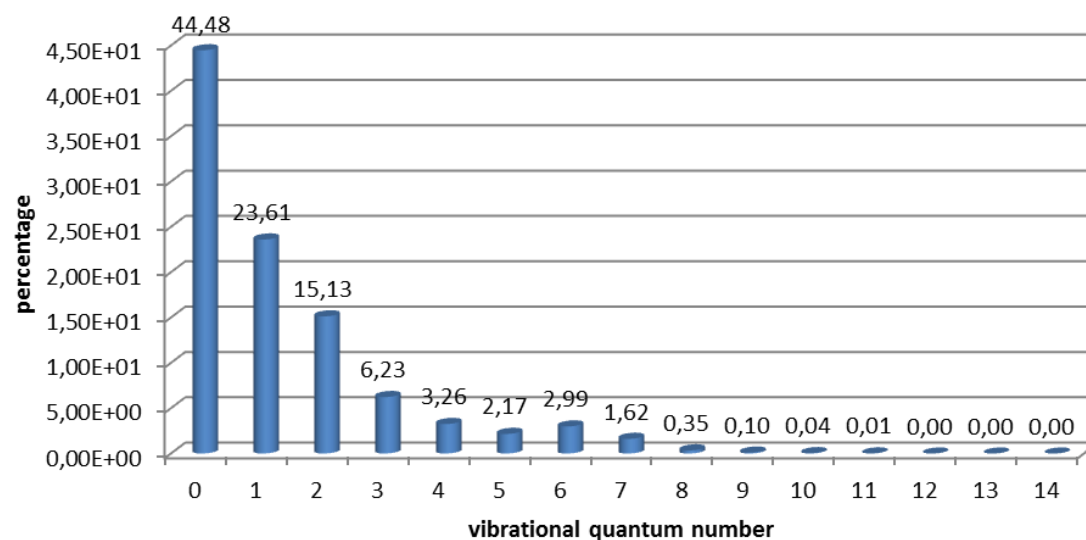


Рис. 59. Доля атомарных ионов Н образовавшихся из разных колебательных состояний в реакции  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(D^1\Pi_u) + e \rightarrow 2H + e$

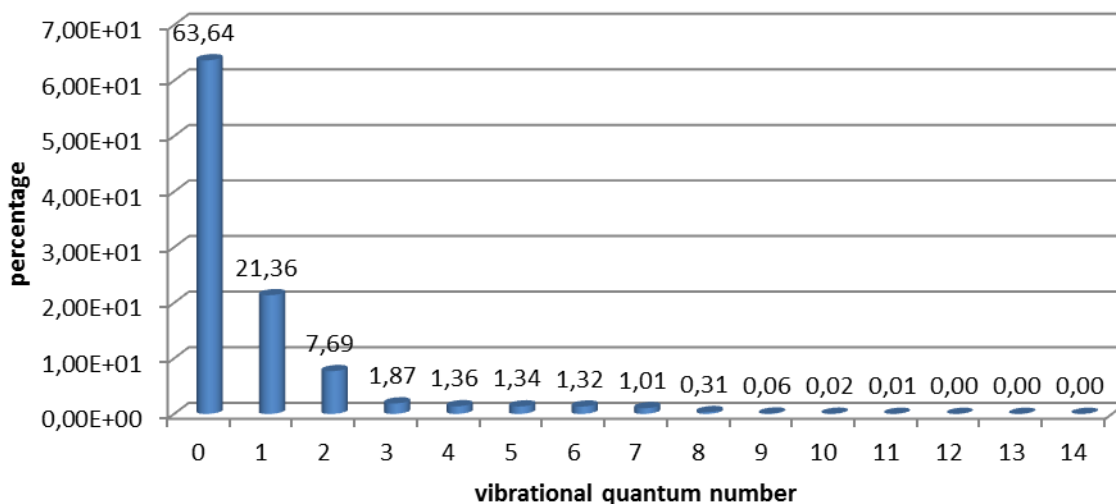


Рис. 60. Доля атомарных ионов Н образовавшихся из разных колебательных состояний в реакции  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(B''^1\Sigma_u^+) + e \rightarrow 2H + e$

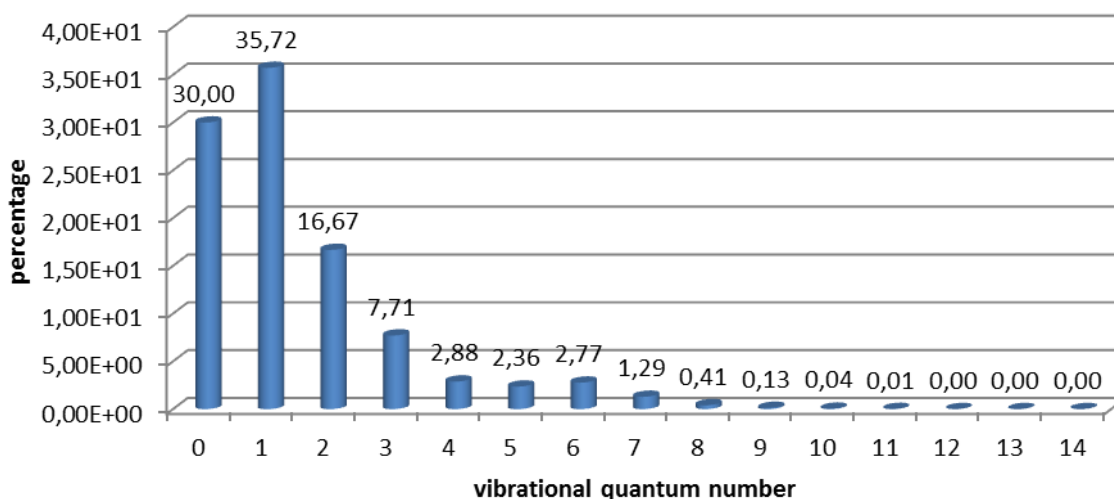


Рис. 61. Доля атомарных ионов Н образовавшихся из разных колебательных состояний в реакции  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(D^1\Pi_u) + e \rightarrow 2H + e$

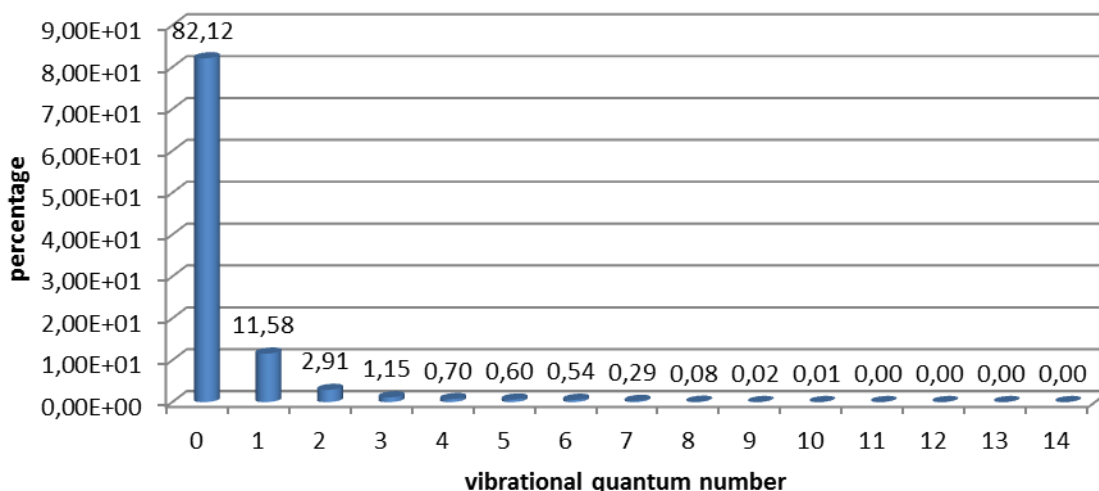


Рис. 62. Доля атомарных ионов Н образовавшихся из разных колебательных состояний в реакции  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v_i) + e \rightarrow H_2(b^3\Sigma_u^+) + e \rightarrow H(1s) + H(1s) + e$



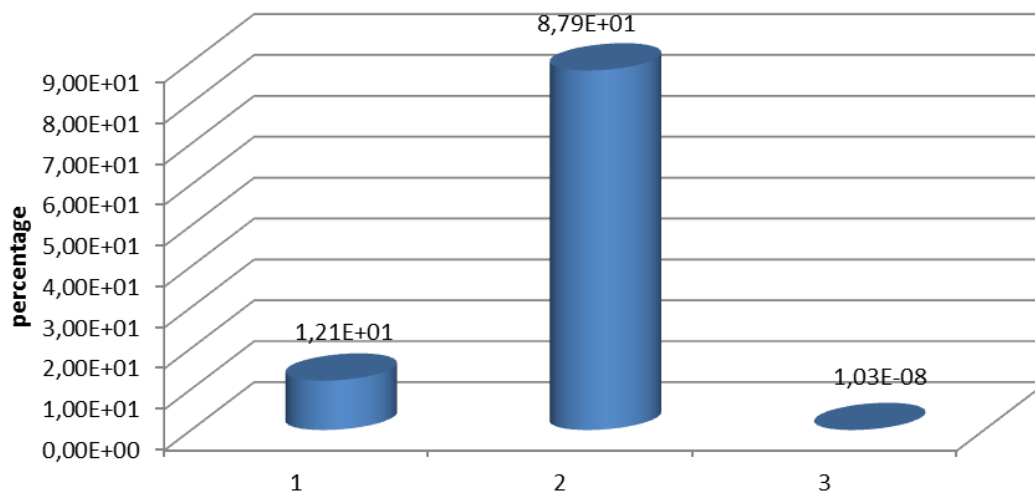


Рис. 63 Доля молекулярных ионов  $H_2^+$  рекомбинировавших в различных реакциях :  
 1.  $H_2^+ + H \rightarrow H_2 + H^+$  2.  $e + H_2^+ \rightarrow H(1) + H(n)$  3.  $e + e + H_2^+ \rightarrow e + 2H$

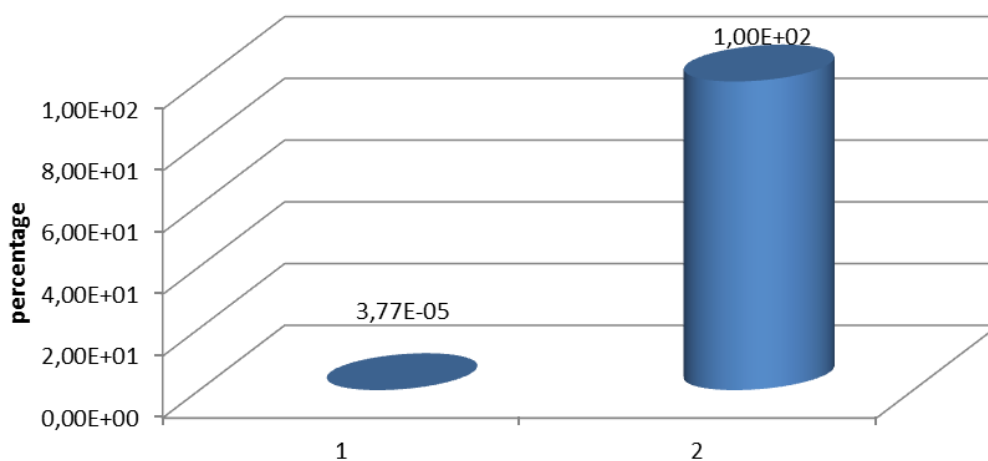


Рис. 64. Процент атомарных ионов  $H^+$  рекомбинировавших в различных реакциях :  
 1.  $e + e + H^+ \rightarrow e + H(n)$  2.  $e + H^+ \rightarrow H + h\nu$

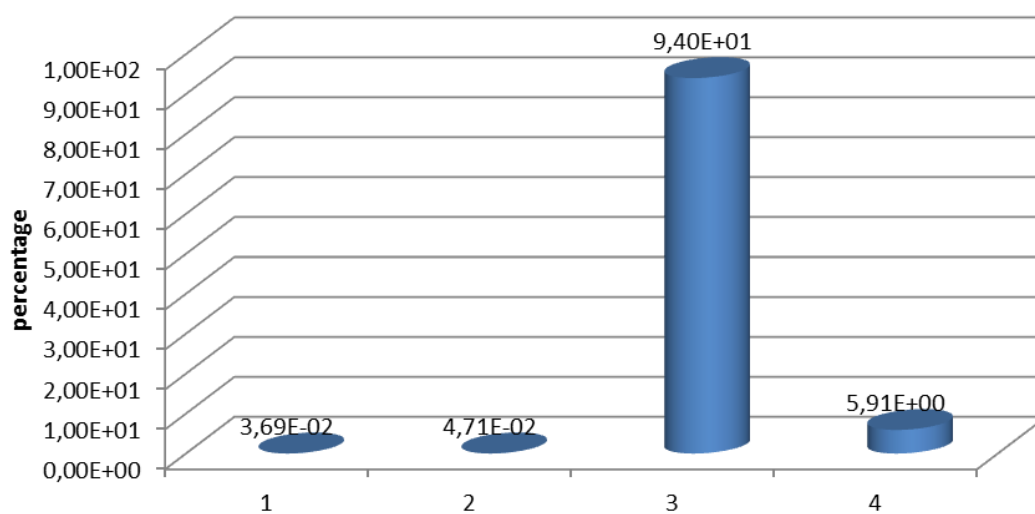


Рис. 65. Уход нейтральных атомов за счет различных механизмов:  
 1.  $H + e \rightarrow H^+ + e + e$  3.  $H + H + H_2 \rightarrow H_2(X, v=14) + H_2$   
 2.  $H_2^+ + H \rightarrow H_2 + H^+$  4.  $H + H + H \rightarrow H_2(X, v=14) + H$

## Литература

1. Райзер Ю.П. Физика газового разряда. М.: Наука, 1987. 591 с.
2. Райзер Ю.П., Суржиков С.Т. Двухмерная структура нормального тлеющего разряда и роль диффузии в формировании катодного и анодного пятен. // ТВТ. 1988. Т. 25. № 3. С. 428.
3. Райзер Ю.П., Суржиков С.Т. Диффузия зарядов вдоль тока и эффективный метод устранения счетной диффузии // ТВТ. 1990. Т. 27. № 3. С.8.
4. Surzhikov S.T. Computational Physics of Electric Discharges in Gas Flows. Walter de Gruyter GmbH, Berlin/Boston. 2013. 428 p.
5. Surzhikov S.T., Shang J.S. Normal Glow Discharge in Axial Magnetic Field// Plasma Sources Sciences and Technology. 2014, Vol.23. 054017 (8pp.) DOI 10.1088/0963-0252/23/5/054017.
6. Allan M. Experimental observation of structures in the energy dependence of vibrational excitation in H<sub>2</sub> by electron impact in the 2Σ<sup>+</sup> resonance region //Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics. – 1985. – Т. 18. – №. 13. – P. L451.
7. Laricchiuta, A., Celiberto, R., Esposito, F., and Capitelli, M., “State-to-state cross sections for H<sub>2</sub> and its isotopic variants,” *Plasma Sources Science and Technology*, vol. 15, May 2006, pp. S62–S66.
8. Celiberto R. et al. Cross section data for electron-impact inelastic processes of vibrationally excited molecules of hydrogen and its isotopes //Atomic Data and Nuclear Data Tables. – 2001. – Т. 77. – №. 2. – Pp. 161–213.
9. Сторожев Д.А., Суржиков С.Т. Численное моделирование двухмерной структуры тлеющего разряда в молекулярном азоте с учетом колебательной кинетики //Теплофизика высоких температур. – 2015. – Т. 53. – №. 3. – С. 325-336.
10. Storozhev D.A., Surzhikov S.T., “Numerical Simulation of Two-Dimensional Structure of Glow Discharge in Molecular Hydrogen” AIAA paper, 45th AIAA Thermophysics Conference, 2015, 10.2514/6.2015-3108.
11. Сторожев Д.А. Численное моделирование кинетики ионизации и диссоциации водорода в плазме разряда Пеннинга в приближении ЛТР // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2014. Т. 15. Вып.3. 6с. <http://chemphys.edu.ru/issues/2014-15-3/articles/229/>
12. Storozhev D.A., Surzhikov S.T., Numerical Simulation of Glow Discharge in a Magnetic Field Through the Solution of the Boltzmann Equation. // Journal of basic and applied physics, 2013, Vol. 2, Iss. 3, pp. 141–147
13. Сторожев Д.А., Суржиков С.Т., Куратов С.Е. Анализ кинетических процессов в тлеющем разряде в молекулярном водороде. // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2014. Т. 15, вып. 6. 21с. <http://chemphys.edu.ru/issues/2014-15-6/articles/267/>
14. Селезнев Р.К., Суржиков С.Т. Численный метод решения уравнений химической кинетики // Препринт № 1037 Института Проблем Механики РАН. 2013.
15. Seleznev, R.K., Surzhikov, S.T. "A Generalized Newton Method for Differential Equation of Chemical Kinetics" AIAA 2013-3009. 44th AIAA Thermophysics Conference, June 24-27, 2013, San Diego, CA. 17 p.
16. Горбунов А.А., Селезнев Р.К. Моделирование горения водорода в канале модельного ГПВРД. //Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2013, Том 14, вып.4. 4с. <http://chemphys.edu.ru/issues/2013-14-4/articles/421/>
17. Селезнев Р.К. Исследование обобщенного метода Ньютона для решения системы дифференциальных уравнений химической кинетики на примере горения углеводорода в кислороде //Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2013, Том 14, вып.4. 6с. <http://chemphys.edu.ru/issues/2013-14-4/articles/430/>
18. Жорник К.А., Селезнев Р.К. Расчет интегральных характеристик силовых установок ПВРД //Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2014, Том 15, вып. 2. 5с. <http://chemphys.edu.ru/issues/2014-15-2/articles/219/>

19. Селезнев Р.К. На пути к гиперзвуку. Краткий исторический обзор //Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2014. Т.15, вып. 3. 14с. <http://chemphys.edu.ru/issues/2014-15-3/articles/228/>
20. Surzhikov, S.T., Seleznev, R.K., Tretjakov, P.K., Zabaykin, V.A., "Unsteady Thermo-Gasdynamic Processes in Scramjet Combustion Chamber with Periodical Input of Cold Air," AIAA 2014-3917. 50th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference, 2014.
21. Селезнев Р.К., Жорник К.А. Квазиодномерное численное моделирование водородо-воздушной смеси в канале ГПВРД//Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2014. Т.15, вып. 4. 7с. <http://chemphys.edu.ru/issues/2014-15-4/articles/30/>
22. Polezhaev, Yu.V. , Seleznev, R.K. "Numerical Study of the Processes of Resonance Emergence in the Experimental Setup of a Pulse Detonation Engine" High Temperature, 2014, Vol. 52, No. 2, pp. 226–230.
23. Seleznev, R.K., Surzhikov, S.T., "Quasi-One-Dimensional and Two-Dimensional Numerical Simulation of Scramjet Combustors," AIAA 2015-4166. 51th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference, 2015. Orlando, Florida.

Статья поступила в редакцию 20 ноября 2015 г.