

Direct Statistical Simulation of Oxygen Radiation behind Shock Wave

A. L. Kusov, P. V. Kozlov, I. E. Zabelinskii, N. G. Bykova,
V. Yu. Levashov, G. Ya. Gerasimov

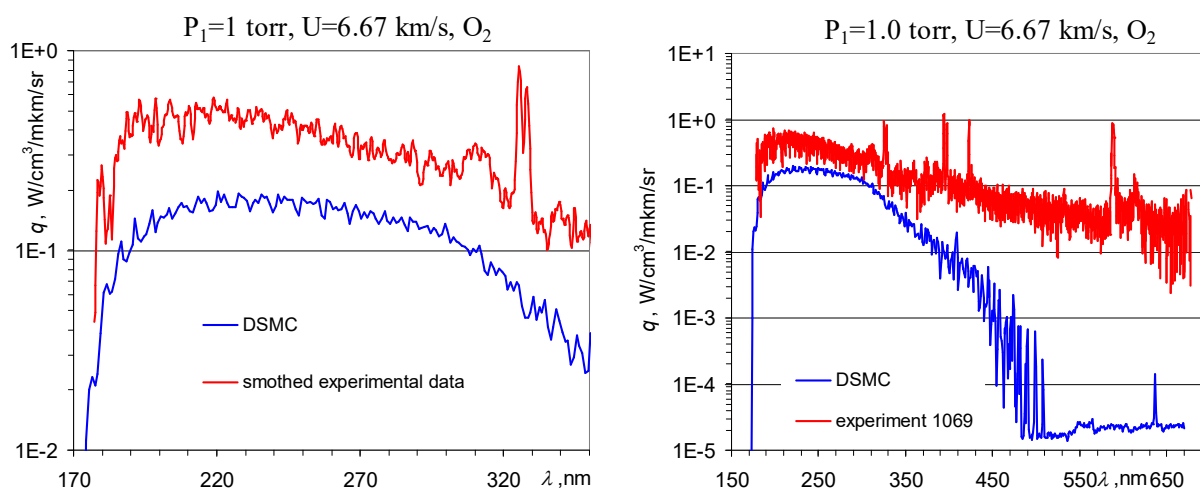
*Institute of Mechanics, Lomonosov Moscow State University,
Moscow, 119192, Russia*

kusov_al@mail.ru, vyl69@mail.ru

Abstract

The technique for modeling the radiation of shock heated oxygen by the DSMC (Direct Simulation Monte-Carlo) method is described, taking into account the rates of chemical reactions, excitation of vibrational, rotational and electronic degrees of freedom of oxygen molecules. The simulation results are compared with experimental data on measuring the radiation of shock heated oxygen in the shock tube of the Institute of Mechanics, Moscow State University.

Keywords: oxygen molecule radiation, direct simulation Monte Carlo simulation, shock wave, shock wave heated gas, electronic levels, excitation cross section.



Comparison between experimental and numerical simulation data in different spectrum scale, pressure before shock wave 1 torr, its velocity 6.67 km/s

УДК 533.92+533.93

Прямое статистическое моделирование излучения за фронтом ударной волны в кислороде

А.Л. Кусов, П.В. Козлов, Н.Г. Быкова, И.Е. Забелинский,
В.Ю. Левашов, Г.Я. Герасимов

*НИИ Механики Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова,
Москва, 119192, Мичуринский проспект, 1*

vyl69@mail.ru

Аннотация

Описана методика моделирования излучения ударно нагретого кислорода методом прямого статистического моделирования Монте-Карло с учетом скоростей химических реакций, возбуждения колебательных, вращательных и электронных степеней свободы молекул кислорода. Приведено сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными по измерению излучения ударно нагретого кислорода на ударной трубе НИИ Механики МГУ.

Ключевые слова: кислород, излучение, метод прямого статистического моделирования Монте-Карло, ударно нагретый газ, электронные уровни, сечение возбуждения, ударная волна.

1. Введение

За последние годы достигнут значительный прогресс в понимании физико-химических процессов, происходящих в высокотемпературных газах [1]. Удалось приближённо описать структуру уровней атомных электронов, найти силы осцилляторов атомных переходов, приближённо описать электронные уровни двухатомных молекул, колебательные и вращательные спектры, найти силы осцилляторов электронно-колебательно-вращательных переходов. Идут исследования по определению скоростей химических реакций, возбуждения электронных мод атомов, молекул и их ионов. Одним из источников экспериментальных данных по скоростям этих процессов является исследование излучения в ударных трубах. Путём сравнения численного моделирования с экспериментальными данными можно проверить адекватность физических моделей и подобрать параметры этих моделей. В данной работе описаны некоторые результаты сравнения численных расчётов излучения ударно нагретого кислорода методом прямого статистического моделирования (ПСМ) Монте-Карло с экспериментальными данными, полученными в ударных трубах.

2. Физико-химические свойства атомов и молекул кислорода

Подробная база данных электронных уровней атомов, в том числе атома O, приведена в NIST [2]. В данной работе использована модель с 580 уровнями. Упрощённая модель энергетических уровней атомов O и ионов O⁺ [3] приведена в таблице 1. Кратность вырождения уровня определяется как $g_i = (2S + 1)(2L + 1)$, если заданы полный спин S и полный орбитальный момент электронов L , либо $g_i = 2J + 1$, если задан суммарный полный момент электронов J .

Таблица 1

Значения энергий и статистические веса нескольких нижних уровней атома и иона кислорода

O				O ⁺			
No	E_i , эВ		g_i	No.	E_i , эВ		g_i
1	0.00	³ P ₂	5	1	0.0000	⁴ S _{3/2}	4
2	0.02	³ P ₁	3	2	3.3238	² D _{5/2}	6
3	0.03	³ P ₀	1	3	3.3264	² D _{3/2}	4
4	1.97	¹ D ₂	5	4	5.0172	² P _{3/2}	4
5	4.19	¹ S ₀	1	5	5.0174	² P _{1/2}	2
6	9.15	⁵ S ₂	5	6	14.86	⁴ P _{5/2}	6
7	9.52	³ S ₁	3	7	14.88	⁴ P _{3/2}	4
8	10.74	⁵ P ₁	3	8	14.89	⁴ P _{1/2}	2
9	10.74	⁵ P ₂	5	9	20.58	² D _{5/2}	6
10	10.74	⁵ P ₃	7	10	20.58	² D _{3/2}	4
11	10.99	³ P ₁	3	11	22.97	⁴ P _{1/2}	2
12	10.99	³ P ₂	5	12	22.98	⁴ P _{3/2}	4
13	10.99	³ P ₀	1	13	23.00	⁴ P _{5/2}	6
14	11.84	⁵ S ₂	5				
15	11.93	³ S ₁	3				

Молекула O₂ является гомоядерной, т.е. состоит из одинаковых ядер и имеет группу симметрии $D_{\infty h}$. Для гетероядерных молекул с группой симметрии $C_{\infty v}$ и гомоядерных молекул с проекциями полного момента количества движения Λ и спина Σ на межъядерную ось кратность вырождения равна (Λ -удвоение)

$$g_i = \begin{cases} 2(2\Sigma + 1), & \Lambda > 0, \\ 2\Sigma + 1, & \Lambda = 0 \end{cases} \quad (1)$$

Спины обоих ядер могут иметь разные проекции на выделенную ось, поэтому кратность вырождения следовало бы умножить на $(2i_1 + 1)(2i_2 + 1)$, где i_1 и i_2 – спины обоих ядер. Но в случае разных атомов такое умножение не даёт никаких новых физических эффектов и множитель $(2i_1 + 1)(2i_2 + 1)$ сокращается при вычислении любых средних величин.

Для гомоядерных молекул всё несколько усложняется. Рассмотрим уровни энергии двухатомной молекулы. Волновую функцию можно разложить на три составляющие: функцию $\psi = \Phi_e(x_e)$, зависящую от координат электронов, функцию $\Phi_p(x_p)$, зависящую от координат атомов, функцию $u_e(\sigma)$, зависящую от спинов электронов и функцию $u_p(i)$, зависящую от спинов атомов

$$\psi = \Phi_e(x_e)\Phi_p(x_p)u_e(\sigma)u_p(i) \quad (2)$$

Эта волновая функция удовлетворяет уравнению Шредингера

$$H\psi = E\psi \quad (3)$$

Нас интересует кратность вырождения определённого уровня энергии. Электроны имеют суммарный спин S , суммарная проекция орбитального момента электронов на межъядерную ось равна Λ , момент вращения ядер равен R , полный момент всей системы равен J .

Для молекулы из симметричных ядер гамильтониан не изменится при перестановке ядер, но при этом изменится направление движения электронов на противоположное.

Инверсия координат электронов не меняет состояния, поэтому волновые функции делятся на чётные $|g\rangle$, для которых не меняется знак волновой функции и нечётные $|u\rangle$, для которых знак меняется на противоположный. Изменение направления вращения электронов меняет только знак проекции орбитального момента электронов на межъядерную ось и для $\Lambda = 0$ (для Σ -термов) приводит существованию положительных (Σ^+) и отрицательных термов (Σ^-) термов. При $\Lambda \neq 0$ волновая функция является линейной комбинацией положительных (Λ^+) и отрицательных (Λ^-) термов $|\Lambda\rangle = a_1|\Lambda^+\rangle + a_2|\Lambda^-\rangle$ и, таким образом, приводит в случае $\Lambda \neq 0$ к двукратному вырождению уровней.

Полная волновая функция должна быть симметричной, либо антисимметричной относительно перестановки ядер в зависимости от спина ядер (бозоном или фермионом они являются). Волновая функция, зависящая от спина ядер $u_p(i)$ может быть как симметричной, так и антисимметричной. Её симметрия зависит как от волновой функции, зависящей от координат ядер, так и от обеих частей волновых функций электронов. Перестановка ядер может привести к изменённому электронному состоянию. Например, проекция суммарного электронного момента на межъядерную ось относится к определённой ориентации ядер. При перестановке ядер электроны фактически начинают вращаться в противоположную сторону.

Координатная функция при заданном орбитальном моменте l при инверсии меняется как $(-1)^l$, т.е. для чётных l волновая функция не меняет знака, для не чётных l знак меняется.

Рассмотрим какой симметрией обладает волновая функция для Σ -термов, которые подчиняются случаю связи $b)$ по Гунду. Сделаем только перестановку ядер, при этом полная волновая функция должна быть симметричной (если ядра – бозоны) или антисимметричной (если ядра – фермионы). Обозначим чётность всей волновой функции по перестановке ядер как $(-1)^{P_p}$, тогда для ядра-фермиона $P_p = 1$, а для ядра-бозона $P_p = 0$. Тогда при перестановке ядер волновая функция поменяется как

$$\psi' = (-1)^{P_p} \psi = \Phi'_e(x_e) \Phi'_p(x_p) u'_e(\sigma) u'_p(i), \quad (4)$$

где $\psi = \Phi_e(x_e) \Phi_p(x_p) u_e(\sigma) u_p(i)$ – исходная волновая функция.

Нас в принципе интересует как изменится функция $u_p(i)$ при перестановке ядер, она может оказаться симметричной, либо антисимметричной. Так как при перестановке ядер электроны начинают вращаться в противоположную сторону (это состояние можно также получить зеркальным отражением всей системы в любой плоскости, проходящей через ось молекулы), электронная волновая функция меняется как

$$\Phi'_e(x_e) u'_e(\sigma) = (-1)^{P^+} \Phi_e(x_e) u_e(\sigma), \quad (5)$$

где $P^+ = 1$ для Σ^- термов и $P^+ = 0$ для Σ^+ термов. Если бы полный момент вращения атомов молекулы состоял только момента вращения ядер R , можно было бы утверждать что координатная волновая ядер поменяется как

$$\Phi'_p(x_p) = (-1)^R \Phi_p(x_p) \quad (6)$$

И мы бы получили окончательно

$$\psi' = (-1)^{P_p} \psi = \Phi'_e(x_e) \Phi'_p(x_p) u'_e(\sigma) u'_p(i) = (-1)^R \Phi_p(x_p) (-1)^{P^+} \Phi_e(x_e) u_e(\sigma) u'_p(i) \quad (7)$$

Откуда мы бы получили соотношение

$$u'_p(i) = (-1)^{P_p - R - P^+} u_p(i) \quad (8)$$

Далее, зная симметрию функции $u_p(i)$, можно было бы сказать сколько различных состояний $i(2i+1)$ или $(i+1)(2i+1)$ по атомному спину относиться к данному уровню энергии в соответствии с тем сколько симметричных и антисимметричных состояний имеется.

Однако в случае *b*) по Гунду сохраняются полный момент $K = R + \Lambda$, т.е. фактически невозможно выделить только момент R . Поэтому вернёмся снова к изменению волновой функции и наряду с перестановкой ядер переставим также и электроны, т.е. фактически сделаем инверсию координат. Тогда координатная часть волновая функция $\Phi_e(x_e)\Phi_p(x_p)$ поменяется как

$$\Phi_e''(x_e)\Phi_p''(x_p) = (-1)^K \Phi_e(x_e)\Phi_p(x_p) \quad (9)$$

Нам пришлось сделать также инверсию и для электронов, чего мы изначально делать не собирались, т.к. нас интересует только перестановка ядер. Поэтому нужно провести обратную инверсию координат только электронов, при этом волновая функция меняется как

$$\Phi_e'(x_e) = (-1)^{P_g} \Phi_e(x_e), \quad (10)$$

где $P_g = 1$ для нечётных термов Σ_u и $P_g = 0$ для чётных термов Σ_g . Тогда изменение координатной функции при перестановке ядер равно

$$\Phi_e(x_e)\Phi_p'(x_p) = (-1)^K (-1)^{P_g} \Phi_e(x_e)\Phi_p(x_p) \quad (11)$$

В этом случае изменение части волновой функции, связанной с ядерным спином равно

$$u_p'(i) = (-1)^{P_p - P_u - K - P_s} u_p(i) \quad (12)$$

То есть, например, для ядер-фермионов $P_p = 1$ и Σ_g^+ терма $P_u^- = 0, P_g = 0$, поэтому получаем

$$u_p'(i) = (-1)^{1-K} u_p(i) \quad (13)$$

С учётом того, что K может быть только целым числом, получаем

$$u_p'(i) = (-1)^{K+1} u_p(i) \quad (14)$$

То есть функция меняет знак для чётных значений момента и не меняет для нечётных. Приведём полную таблицу симметрии термов

$$\left. \begin{array}{l} u_p'(\Sigma_g^+) = (-1)^{K+1} u_p \\ u_p'(\Sigma_g^-) = (-1)^K u_p \\ u_p'(\Sigma_u^+) = (-1)^K u_p \\ u_p'(\Sigma_u^-) = (-1)^{K+1} u_p \end{array} \right\} \text{для фермионов,} \quad \left. \begin{array}{l} u_p'(\Sigma_g^+) = (-1)^K u_p \\ u_p'(\Sigma_g^-) = (-1)^{K-1} u_p \\ u_p'(\Sigma_u^+) = (-1)^{K-1} u_p \\ u_p'(\Sigma_u^-) = (-1)^K u_p \end{array} \right\} \text{для бозонов} \quad (15)$$

Симметрия функции $u_p(i)$ зависит только от полного суммарного спина ядер I . При этом число симметричных g_s и антисимметричных g_a равно

$$\left. \begin{array}{l} g_s = i(2i+1) \\ g_a = (i+1)(2i+1) \end{array} \right\} \text{для фермионов,} \quad \left. \begin{array}{l} g_a = i(2i+1) \\ g_s = (i+1)(2i+1) \end{array} \right\} \text{для бозонов} \quad (16)$$

Используя (15) фактически была найдена зависимость $u_p(i)$ от полного спина. Таким образом определяя симметрию функции $u_p(i)$ исходя из значения момента K по формуле (15), можно далее рассчитать число состояний из (16). Например, при $i=0$ кратность уровня $g_a = 0$ и не существует антисимметричных состояний, т.е. не существует Σ_g^+ и Σ_u^- с нечётными K , а также Σ_u^+ и Σ_g^- с чётными K .

В таблице 2 приведены следующие параметры уровней молекул [4]: E – энергия уровня; g_i – кратность вырождения; ω – колебательный квант; x_e – постоянная ангармонизма; B_e° – вращательный квант; V_{\max} – число колебательных уровней; J_{\max} – число вращательных уровней; E_d – энергия диссоциации с данного уровня.

Таблица 2

 Свойства уровней молекулы O_2

i	E, eV	g_i	уровень	ω, K	x_e	B_e, K	V_{\max}	J_{\max}	E_d
1	0	3	$X^3\Sigma_g^-$	2274	7.58E-03	2.068	39	249	5.12
2	0.98	2	$a^1\Delta_g$	2134	8.70E-03	2.052	30	234	4.14
3	1.64	1	$b^1\Sigma_g^+$	2061	9.77E-03	2.015	–	–	–
4	4.1	1	$c^1\Sigma_u^+$	1143	1.60E-02	1.316	–	–	–
5	4.3	6	$C^3\Delta_u$	1223	2.35E-02	1.381	–	–	–
6	4.39	3	$A^3\Sigma_u^+$	1150	1.52E-02	1.31	12	133	0.82
7	4.87	10	$^5\Pi_g$	288	0	0.763	–	–	–
8	6.17	3	$B^3\Sigma_u^-$	1021	1.50E-03	1.178	25	143	1.01
9	6.7	3	$^3\Sigma_u^-$	773	2.56E-02	0.705	–	–	–
10	6.88	6	$^3\Pi_g$	288	0	1.024	–	–	–
11	7.07	6	$^3\Pi_g$	288	0	0.821	–	–	–
12	8.41	2	$^1\Pi_g$	2340	1.01E-01	1.178	–	–	–
13	8.41	6	$^3\Pi_g$	2340	1.01E-01	1.178	–	–	–
14	8.57	2	$^1\Delta_u$	1015	1.36E-02	1.134	–	–	–
15	8.57	6	$^3\Delta_u$	1015	1.36E-02	1.134	–	–	–
16	9.03	2	$^1\Delta_g$	719	2.70E-02	0.787	–	–	–
17	9.28	2	$^1\Phi_g$	288	0	0.757	–	–	–
18	9.33	3	$D^3\Sigma_u^+$	2816	1.01E-02	2.489	–	–	–
19	9.43	1	$f^1\Sigma_u^+$	2773	9.86E-03	2.45	–	–	–
20	9.9	3	$E^3\Sigma_u^+$	3665	0	2.106	–	–	–
21	10.19	1	$^1\Sigma_u^+$	1140	9.72E-03	1.167	–	–	–

В работе используются простые модели вращательной и колебательной энергии. Вращательная энергия двухатомной молекулы на уровне $|JM\rangle$ и кратность вырождения уровня равны

$$E = kB_e J(J+1), \quad g = 2J+1, \quad (17)$$

где k – постоянная Больцмана, B_e – вращательная постоянная молекулы, J – вращательное квантовое число, g – кратность вырождения уровня энергии.

В моделях простого гармонического осциллятора (SHO) и ангармонического осциллятора (UHO) энергия уровня n выражаются как

$$E_{\text{SHO}} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad E_{\text{UHO}} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \left[1 - x_e \left(n + \frac{1}{2}\right)\right], \quad (18)$$

где $\hbar\omega$ – энергия колебательного кванта; x_e – постоянная ангармонизма, n – номер колебательного уровня энергии

3. Моделирование процессов в плазме аргона методом Монте-Карло

Метод прямого статистического моделирования Монте-Карло (ПСМ) основан на построении процесса, который имитирует движение молекул газа и фотонов, столкновение молекул между собой, излучение атомами и молекулами фотонов, взаимодействие молекул и фотонов с границами рассматриваемой области. В методе ПСМ большое количество реальных частиц (молекул, атомов, фотонов) заменяется гораздо меньшим набором модельных частиц. Эти модельные частицы движутся в физическом пространстве, сталкиваются с другими частицами и с твердыми границами аналогично реальной газовой динамике. Столкновения частиц моделируются как мгновенный случайный переход системы из одного состояния в другое, что отличает метод ПСМ от метода молекулярной динамики, в котором столкновения рассматриваются детерминировано. Макроскопические свойства, такие как плотность и средняя скорость, получаются в установившихся потоках путем усреднения свойств частиц по времени.

В настоящее время метод ПСМ применяется для моделирования различного рода процессов, в том числе и с учетом различных физико-химических процессов в газовой фазе.

Важно, что метод ПСМ позволяет проводить моделирование на элементарном уровне без привлечения законов статистической физики, в том числе, без привлечения понятия температуры. Геометрическое моделирование движения молекул и фотонов не представляет принципиальных трудностей. Поиск пересечения траектории фотона с границами элементарной ячейки расчётной сетки в двумерном и трёхмерном случаях является геометрической задачей. Рассматривается случай малых длин волн по сравнению с размерами расчётной области, тогда излучение может быть описано в рамках геометрической оптики.

Основную трудность представляют столкновения молекул с возбуждением вращательных, колебательных и электронных степеней свободы.

Используются следующие модели: модель твёрдых сфер переменного диаметра, метод мажорантной частоты, модель полной энергии, модель Ларсена – Боргнакке, модель Бойда для скорости релаксации энергии внутренних степеней свободы.

3.1. Моделирование поступательно-поступательного обмена энергии

К зависимости вязкости от температуры вида $\mu \sim T^\omega$ приводит модель, согласно которой диаметр сталкивающихся частиц d_{ij} при столкновении частиц сортов i и j зависит от относительной скорости следующим образом [5]:

$$d_{ij} \sim d_{ij}^{ref} \sqrt{\left(\frac{2kT_{ref}}{m_{ij}g^2}\right)^{\omega_{ij}-1/2} \frac{1}{\Gamma(5/2-\omega_{ij})}}, \quad (19)$$

где d_{ij}^{ref} и ω_{ij} – постоянные для сортов i и j , но требующие определения величины; $T_{ref}=273\text{K}$; $m_{ij} = m_i m_j / (m_i + m_j)$ – приведённая масса сталкивающихся частиц;

$\Gamma(n) = \int_0^\infty x^{n-1} e^{-x} dx$ – гамма-функция. Рассеяние в модели VHS предполагается изотропным,

т.е. дифференциальное сечение σ и угол рассеяния χ равны

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{d^2}{4}, \quad \chi = 2 \arccos\left(\frac{b}{d}\right), \quad (20)$$

где b – прицельное расстояние; $d\Omega = \sin(\chi) d\chi d\varphi$ – элемент телесного угла, $d = d_{ij}$. Параметры VHS модели для некоторых чистых газов приведены в таблице 3.

Таблица 3

Параметры VHS модели некоторых молекул

Пара частиц	O+O	O ₂ +O	O ₂ +O ₂	O ₂ ⁺ +O ₂	O ₂ ⁺ +O	O ⁺ +O ₂	O ⁺ +O	e ⁻ +O ₂	e ⁻ +O
ω	0.77	0.74	0.65	1.05	1	1	0.9	0.38	0.27
d_{ref} , Å	3.45	3.6	3.7	7.2	5.8	6.9	5.4	1.12	0.77

3.2. Моделирование поступательно-вращательного обмена энергии

Согласно теории Паркера [6] время вращательной релаксации является функцией температуры вида

$$\frac{\tau_{RT}}{\tau_c} = Z_R = \frac{Z_R^\infty}{1 + \frac{\pi^{3/2}}{2} \left(\frac{T_*}{T}\right)^{1/2} + \frac{T_*}{T} \left(\frac{\pi^2}{4} + \pi\right)}, \quad (21)$$

где Z_R^∞ и T_* – константы; τ_c – время свободного пробега молекул; Z_R – среднее число столкновений, необходимое для релаксации вращательной температуры к поступательной.

В работах [7, 8] было предложен алгоритм, в котором лишь доля столкновений молекул равная P_{RT} приводит к изменению вращательной энергии молекул. Вероятность изменению вращательной энергии зависит от относительной скорости сталкивающихся частиц. В работе [8] предложена зависимость вида

$$P_{RT} = \frac{1}{Z_{R\infty}} \left(1 + \frac{\Gamma(2-\eta)}{\Gamma(1.5-\eta)} \sqrt{\frac{kT_*}{E_C}} \frac{\pi\sqrt{\pi}}{2} + (1-\eta) \frac{kT_*}{E_C} \left(\frac{\pi^2}{4} + \pi \right) \right), \quad \eta = \omega_{ij} - \frac{1}{2} - \frac{\xi_1 + \xi_2}{2}, \quad (22)$$

где ξ_1 и ξ_2 – число внутренних степеней свободы первой и второй сталкивающихся молекул; E_C – полная энергия столкновения.

В таблице 4 приведены параметры $Z_{R\infty}$ и T_* , приведённые в работе [8] и рекомендованные в данной работе исходя из данных различных авторов по вращательно-поступательной релаксации.

Таблица 4

Параметры поступательно-вращательной релаксации

молекула	$Z_{R\infty}$	T_*
O ₂	22	113.5

3.3. Моделирование поступательно-колебательного обмена энергии

В работе [8] предложено ввести вероятность поступательно-колебательного (VT) обмена в виде

$$P_{VT} = \frac{1}{Z_0} g^{3+2(\omega_{ij}-1/2)} \exp\left(-\frac{g_*}{g}\right), \quad g = \sqrt{\frac{2E_C}{m_{ij}}}, \quad (23)$$

где параметр α выражен через параметр VHS модели как $\alpha = 3 + 2(\omega_{ij} - 1/2)$.

В работе [8] предложено считать, что при больших температурах $p\tau_{VT} \approx \text{const}$. К такой зависимости приводит вероятность VT обмена вида

$$P_{VT} = \frac{1}{Z_2} g^{2\omega_{ij}}, \quad g = \sqrt{\frac{2E_C}{m_{ij}}} \quad (24)$$

Время VT релаксации с учётом высокотемпературной коррекции выражается в виде

$$P_{VT} = \min \left[\frac{1}{Z_0} g^{3+2(\omega_{ij}-1/2)} \exp\left(-\frac{g_*}{g}\right), \frac{1}{Z_2} g^{2\omega_{ij}} \right], \quad g = \sqrt{\frac{2E_C}{m_{ij}}} \quad (25)$$

Параметр g_* удобно выразить через параметр a потенциала взаимодействия Борна – Майера в виде

$$g_* = \frac{4\pi^2 \Theta_V c a}{c_2}, \quad (26)$$

где Θ_V – колебательный квант, выраженный в градусах Кельвина; c – скорость света; $c_2 = hc/k$ – вторая радиационная постоянная. Величина a в отличие от g_* имеет ясный физический смысл. В таблице 5 приведены параметры Z_0, Z_2 и a , рекомендованные в данной работе исходя из данных различных авторов по колебательно-поступательной релаксации. Также в табл. 5 приведена энергия диссоциации E_d в расчёте на одну молекулу.

Таблица 5

Параметры поступательно-колебательной релаксации

молекула	E_d , эВ	Θ_V , К	a , Å	Z_0	Z_2
O ₂	5.12	2240	0.09	2×10^{13}	10^7

3.4 Моделирование химических реакций

Константу скорости реакции принято выражать в виде

$$K_d = AT^n e^{-E_d/kT}, \quad (27)$$

где n и A – константы, описывающие скорость реакции; E_d – энергия порога реакции (например, диссоциации).

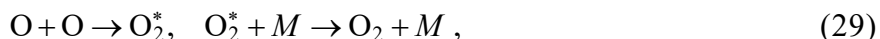
Для описания химической кинетики наиболее часто используется и хорошо себя зарекомендовала модель полной энергии столкновения (англ. TCE – Total Collision Energy) [5], в которой вероятность P бинарной реакции выражается в виде

$$P = \frac{A \Gamma(\xi/2 + 5/2 - \omega_{ij})}{\Gamma(n + \xi/2 + 3/2) \pi (d_{ij}^{ref})^2 k^n} \sqrt{\frac{m_{ij}}{8\pi}} (kT_{ref})^{1/2 - \omega_{ij}} \left(1 - \frac{E_d}{E_C}\right)^{n + \xi/2 + 1/2} E_C^{\omega_{ij} + n - 1} \theta(E_C - E_d), \quad (28)$$

где $\theta(x - x_0)$ – функция Хэвисайда; E_C – полная энергия сталкивающихся частиц; ξ – число степеней свободы сталкивающихся частиц.

Если столкновение привело к диссоциации в соответствии с вероятностью P , производится столкновение молекулы с частицей по обычным правилам с перераспределением энергии в соответствии с методом Ларсена и Боргнакке. При этом из полной энергии столкновения вычитается (или прибавляется) энергия реакции. После столкновения проводится процедура разделения молекулы на два атома (в случае диссоциации) или изменения сортов сталкивающихся частиц (в случае обменной реакции).

Рекомбинация моделируется двумя последовательными бинарными столкновениями



где O_2^* – возбуждённая молекула; M – третья частица.

После того, как известно, что третья частица имеет сорт M , вероятность рекомбинации определяется выражением

$$P = \frac{An_M \Gamma(5/2 - \omega)}{\Gamma(n + 3/2) \pi d_{ref}^2 k^n} \sqrt{\frac{m}{16\pi}} (kT_{ref})^{1/2 - \omega} E_C^{\omega + n - 1}, \quad (30)$$

где ω соответствует столкновению двух атомов; m – масса атома; константа скорости рекомбинации записана в виде $K_r = AT^n$.

В данной работе константа скорости реакции используется в модифицированном виде

$$K_d = AT^n e^{-T_a/T} \left[1 - \exp\left(-\frac{\Theta_V}{T}\right) \right] \quad (31)$$

При вычислении члена $1 - \exp(-\Theta_V/T)$ температура T вычисляется из энергии сталкивающихся частиц.

В результате реакции возможно образование возбуждённых частиц A^* при условии, что энергии реакции достаточно для возбуждения. В модель был введён параметр P_{ex} .

В таблице 6 даны константы скоростей реакций вида (31), использованные в расчётах и величины P_{ex} .

Таблица 6

Константы скоростей реакций

реакция	A	n	T_a , К	Θ_V , К	P_{ex}	Размерность
$O_2 + O_2 \rightarrow O + O + O_2$	2.1×10^{16}	0	59400	2240	1	см ³ /моль/с
$O + O + O_2 \rightarrow O_2 + O_2$	3.0×10^{16}	-0.5	0	0	1	см ⁶ /моль ² /с
$O_2 + O \rightarrow O + O + O$	$2.5 \times 2.1 \times 10^{16}$	0	59400	2240	1	см ³ /моль/с
$O + O + O \rightarrow O_2 + O$	$2.5 \times 3.0 \times 10^{16}$	-0.5	0	0	1	см ⁶ /моль ² /с
$O + O \rightarrow O_2^+ + e^-$	4.2×10^9	0.7	80600	0	1	см ³ /моль/с
$O_2^+ + e^- \rightarrow O + O$	1.9×10^{18}	-0.5	0	2240	1	см ³ /моль/с
$O_2 + e^- \rightarrow O_2^+ + e^- + e^-$	4.7×10^{14}	0.5	140148	0	1	см ³ /моль/с
$O_2^+ + e^- + e^- \rightarrow O_2 + e^-$	5×10^{38}	-4.5	0	0	1	см ⁶ /моль ² /с
$O_2 + M(O, O_2) \rightarrow O_2^+ + e^- + M$	3.9×10^{12}	0.5	140148	0	1	см ³ /моль/с
$O_2^+ + e^- + M(O, O_2) \rightarrow O_2 + M$	4.4×10^{19}	-0.86	0	0	1	см ⁶ /моль ² /с
$O_2^+ + O \rightarrow O^+ + O_2$	3.4×10^{10}	0.8	18030	0	1	см ³ /моль/с
$O^+ + O_2 \rightarrow O_2^+ + O$	7.8×10^{11}	0.5	0	0	1	см ³ /моль/с
$O + e^- \rightarrow O^+ + e^- + e^-$	3×10^{14}	0.5	158030	0	1	см ³ /моль/с
$O^+ + e^- + e^- \rightarrow O + e^-$	5×10^{38}	-4.5	0	0	1	см ⁶ /моль ² /с
$O + M(O, O_2) \rightarrow O^+ + e^- + M$	2.5×10^{12}	0.5	158030	0	1	см ³ /моль/с
$O^+ + e^- + M(O, O_2) \rightarrow O + M$	1.9×10^{20}	-0.93	0	0	1	см ⁶ /моль ² /с

Константы скоростей реакций получены для основного уровня атомов и молекул, однако они же применяются и для возбуждённых уровней, при этом энергия реакции E'_a поправляется на энергии возбуждения участвующих частиц

$$E'_a = E_a - \sum_{i=1}^N E_l^i > 0, \quad (32)$$

где N – число частиц прямой реакции; E_l^i – энергия возбуждённого уровня l частицы i .

3.5. Моделирование возбуждения электронных уровней энергии

При высокой температуре газового потока начинают возбуждаться электронные уровни атомов и молекул. Хорошее введение в физику этих процессов с базами данных дано в работах [9, 10]. При электронных переходах меняются параметры молекул, поэтому возбуждённая и невозбуждённая молекулы рассматриваются как разные частицы (см. выше).

В простейшей модели сечение возбуждения атома или молекулы электронным ударом согласно определяется как

$$\sigma_* = \pi d_*^2 \left(\frac{\varepsilon}{E_*} - 1 \right), \quad (33)$$

где ε – кинетическая энергия налетающего электрона; E_* – энергия возбужденного электронного уровня; d_* – параметр сечения. То есть предполагается линейный рост сечения при увеличении энергии, что верно при малом превышении энергии ε над E_* .

В борновском приближении аппроксимация сечения возбуждения имеет вид

$$\sigma_* = \pi a_0^2 \left(\frac{d_*}{a_0} \right)^2 \frac{\ln x}{x} \theta(x-1), \quad x = \frac{\varepsilon}{E_*}, \quad (34)$$

где $d_* \sim a_0$ – параметр модели (диаметр столкновения); $a_0 = 0.52917706 \text{ \AA}$ – радиус первой борновской орбиты; $\theta(x)$ – функция Хэвисайда. Данная зависимость вполне адекватно описывает зависимость сечения возбуждения от энергии.

Модель полной энергии Бёрда (ТСЕ) [5] предполагает несколько другую функцию для сечения реакции, а в данном случае, для возбуждения электронных уровней

$$\sigma_* = \pi a_0^2 \left(\frac{d_*}{a_0} \right)^2 \frac{(x-1)^\alpha}{x^\beta} \theta(x-1), \quad (35)$$

где α и β дополнительные к d_* параметры модели.

Допустим, что при столкновении частиц сортов i и j происходит переход между уровнями $|m\rangle \rightarrow |n\rangle$. Уровень m – начальный, а уровень n может быть произвольным, лишь бы хватало энергии на соответствующий переход. Обозначим энергии уровней как E_m и E_n , а кратности вырождения соответственно g_m и g_n . Сечение перехода $\sigma_{ij}^{m \rightarrow n}(\varepsilon)$ должно быть задано либо исходя из экспериментальных данных, либо из квантовомеханических расчётов. Как правило $\sigma_{ij}^{m \rightarrow n}(\varepsilon)$ меньше сечения упругого столкновения, поэтому можно использовать похожий на ТСЕ метод. Вероятность изменения электронного состояния равна

$$P_* = \frac{\sum \sigma_{ij}^{m \rightarrow n}(\varepsilon)}{\sigma_{ij}(E_t)}, \quad (36)$$

где $\sigma_{ij}(E_t)$ – сечение упругого рассеяния; с вероятностью P_* частица изменит своё электронное состояние. В методе ТСЕ предполагается, что сечения неупругих процессов гораздо меньше сечения упругого столкновения, поэтому число молекулярных столкновений определяется упругим сечением. С учётом формулы Ч. Пака вероятность P_* равна

$$P_* = \frac{\pi}{4\sigma_{ij}(E_t)} \sum_n \left(d_{ij}^{m \rightarrow n} \right)^2 \frac{\ln x_{m \rightarrow n}}{x_{m \rightarrow n}},$$

$$x_{m \rightarrow n} = \begin{cases} E_p/E_n, & m < n, \\ E_p/E_m, & m > n, \end{cases}$$

$$E_p = E_t + E_m, \quad (37)$$

где E_p – сумма поступательной энергии относительного движения E_t и энергии начального уровня E_m .

Если случайная величина γ , равномерно распределённая в интервале $(0, 1)$ $\gamma < P_*$, значит происходит переход на новый уровень m , и необходимо определить его случайным образом. Условная ненормированная вероятность перехода (с учётом того, что переход должен осуществиться) на уровень m равна

$$P_{m \rightarrow n} = \frac{1}{A} (d_{ij}^{m \rightarrow n})^2 \frac{\ln x_{m \rightarrow n}}{x_{m \rightarrow n}} \left(\frac{E_p - E_n}{E_p - E_m} \right) \frac{g_n}{g_m}, \quad A = \sum_n P_{m \rightarrow n} \quad (38)$$

Можно легко показать, что при выборе случайного числа с дискретной функцией распределения [11] совсем не обязательно требовать выполнения условия $\sum_i P_i = 1$. Новое значение поступательной энергии относительного движения E'_i равно

$$E'_i = E_p - E_n \quad (39)$$

Предварительные результаты численного моделирования показывают, что $d_*/a_0 \sim 1$.

Велика вероятность образования возбуждённой частицы при рекомбинации и вообще при химических реакциях, идущих с выделением энергии. Поэтому была введена вероятность что в химической реакции меняются электронные уровни сталкивающихся частиц. Точные значения данных вероятностей пока установить не удалось.

3.6. Моделирование излучения

Для описания процессов излучения-поглощения для дискретного спектра используют коэффициенты Эйнштейна A_{nm} (коэффициент спонтанного излучения), B_{nm} (коэффициент индуцированного излучения), B_{mn} (коэффициент поглощения). При отсутствии внешнего электромагнитного поля энергия излучения, испускаемая одним атомом при переходе $|n\rangle \rightarrow |m\rangle$ равна [12]

$$dE = dt \int_{4\pi} A_{nm} \hbar \omega_{nm} d\Omega, \quad (40)$$

где $d\Omega$ – элемент телесного угла. Уровень m – нижний, основной, уровень n – возбуждённый. Это спонтанное излучение, оно изотропно по направлениям. В литературе наряду с A_{nm} используют безразмерную величину, силу осциллятора f_{nm} , эти величины пропорциональны друг другу [13]

$$4\pi A_{nm} = 4\pi f_{nm} \frac{2e^2 \omega^2}{m_e c^3} = 4\pi \frac{4e^2 \omega^3}{3\hbar c^3} S_{nm}, \quad f_{nm} g_n = f_{mn} g_m, \quad (41)$$

где $\lambda = 2\pi c/\omega$ – длина волны; e и m_e – заряд и масса электрона; c – скорость света; S_{nm} – сила линии перехода $|n\rangle \rightarrow |m\rangle$.

Помимо спонтанного излучения, существует ещё вынужденное излучение. Излучаемая атомом энергия при индуцированном излучении зависит от спектральной интенсивности излучения I_ν

$$dE = dt \int_{4\pi} B_{nm} I_{vnm} \hbar \omega_{nm} d\Omega \quad (42)$$

Один атом при переходе $|n\rangle \rightarrow |m\rangle$ поглощает энергию, равную

$$dE = dt \int_{4\pi} B_{mn} I_{vnm} \hbar \omega_{nm} d\Omega \quad (43)$$

Энергия Q_r , излучаемая средой в объёме V определяется

$$Q_r = \sum_{m,n} 4\pi \hbar \omega_0 B_{mn} n_m V \left[1 - \exp\left(-\frac{\hbar \omega_0}{KT}\right) \right] B_v(T) = 4\pi \kappa'_v B_v(T) V, \quad (44)$$

где $B_v(T)$ – равновесная планковская интенсивность излучения; ω_0 – частота линии; n_m – плотность излучающих атомов.

Начальный “вес” фотона на этапе запуска определяется, как

$$W_t = \frac{Q_r}{N_{ph} \hbar \omega}, \quad (45)$$

где N_{ph} – запускаемое число фотонов.

Силы осцилляторов для атомов взяты из базы данных NIST [2]. Энергия молекулы складывается из энергии электронного уровня E_e , вращательной энергии E_R и колебательной энергии E_V .

$$E = E_e + E_R + E_V \quad (46)$$

Параметрами, характеризующими двухатомную молекулу, являются номер её колебательного уровня V , вращательное квантовое число J , проекция момента количества движения на межъядерную ось молекулы Λ , полный спин электронов молекулы S . Отдельная линия молекулы это переход между двумя состояниями, в каждом из которых фиксированы S, Λ, V и J . Соответственно, при переходе из верхнего состояния $|2\rangle$ в нижнее $|1\rangle$ энергия кванта рассчитывается как

$$\hbar \omega = E_{e_2} + E_{J_2} + E_{V_2} - E_{e_1} - E_{J_1} - E_{V_1} \quad (47)$$

Причём справедливы соотношения [13]

$$E_{e_2} - E_{e_1} \gg |E_{V_2} - E_{V_1}| \gg |E_{J_2} - E_{J_1}| \quad (48)$$

Для расчёта уширения отдельной линии можно пользоваться теорией уширения атомарных линий. Многочисленные молекулярные линии перекрывают друг друга, образуя полосы.

При рассмотрении лучистых тепловых потоков достаточно рассматривать так называемые дипольные переходы. Вероятность квадрупольных переходов более чем на 6 порядков меньше дипольных. Отвлекаясь от поляризации излучения, вероятность перехода в дипольном приближении

$$P \sim \sum_{i=1}^N |\langle 1 | ex_i | 2 \rangle|^2, \quad (49)$$

где x_i – координаты N электронов молекулы; e – их заряд. Переходы, для которых $P = 0$, называются запрещёнными.

Волновую функцию молекулы с достаточной для расчёта вероятности перехода точностью можно разложить на электронную, колебательную и вращательную составляющие,

считая, что движение электронов, вращательное и колебательное движение молекулы происходят независимо

$$| \rangle = |e\rangle |J\rangle |V\rangle \quad (50)$$

Соответственно, вероятность перехода в дипольном приближении

$$P \sim \sum_{i=1}^N |\langle 1 | ex_i | 2 \rangle|^2 dt = \sum_{i=1}^N |\langle J_1 | \langle e_1 | ex_i | e_2 \rangle | J_2 \rangle|^2 |\langle V_1 | V_2 \rangle| dt = A q_{V_1 V_2} S_{J_1 J_2} dt, \quad (51)$$

где $q_{V_1 V_2}$ – фактор Франка – Кондона; $S_{J_1 J_2}$ – фактор Хёнля – Лондона, причём эти коэффициенты нормированы как [14]

$$\sum_{V_1} q_{V_1 V_2} = \sum_{V_2} q_{V_1 V_2} = 1, \quad (52)$$

$$\sum_{J_1} S_{J_1 J_2} = 1 \quad (53)$$

Волновая функция $| \rangle$ раскладывается по полному набору собственных функций. Коэффициенты разложения преобразуются при вращении системы координат и перестановке электронов по определённому представлению $D(1)$. Используя методы теории групп можно показать, что для молекул существуют правила отбора при дипольном излучении

$$\begin{aligned} J_2 - J_1 &= 0, \pm 1 \\ \text{Переход } J_1 = 0 \rightarrow J_2 = 0 &\text{ запрещён} \\ \text{При } \Lambda_1 = \Lambda_2 = 0 \text{ переход } J_1 = J_2 &\text{ запрещён} \\ S_2 - S_1 &= 0 \end{aligned} \quad (54)$$

Для жёсткого ротатора фактор Хёнля – Лондона $S_{J_1 J_2}$ имеет вид [14]

$$\Lambda = \Lambda_1, \quad J = J_1, \quad d\Lambda = \Lambda_2 - \Lambda_1, \quad dJ = J_2 - J_1$$

$$d\Lambda = 1$$

$$S_{J,J+1} = \frac{(J + \Lambda + 1)(J + \Lambda + 2)}{2(J + 1)(2J + 3)}, \quad S_{J,J-1} = \frac{(J - 1 - \Lambda)(J - \Lambda)}{2J(2J - 1)}, \quad S_{J,J} = \frac{(J + \Lambda + 1)(J - \Lambda)}{2J(J + 1)} \quad (55)$$

$$d\Lambda = -1$$

$$S_{J,J+1} = \frac{(J - \Lambda + 1)(J - \Lambda + 2)}{2(J + 1)(2J + 3)}, \quad S_{J,J-1} = \frac{(J + \Lambda - 1)(J + \Lambda)}{2J(2J - 1)}, \quad S_{J,J} = \frac{(J - \Lambda + 1)(J + \Lambda)}{2J(J + 1)}$$

$$d\Lambda = 0$$

$$S_{J,J+1} = \frac{((J + 1)^2 - \Lambda^2)}{(J + 1)(2J + 3)}, \quad S_{J,J-1} = \frac{(J^2 - \Lambda^2)}{J(2J - 1)}, \quad S_{J,J} = \frac{\Lambda^2}{J(J + 1)}$$

Переходы с $dJ = 0$ называются Q-ветвью, с $dJ = 1$ – R-ветвь, $dJ = -1$ – P-ветвь.

Таблица 7

Система полос Шумана – Рунге молекулы O_2

Молекула	Состояние	Энергия возбуждения, эВ	Система полос
O_2	$B^3\Sigma_u^-$	6.17	$B^3\Sigma_u^- \rightarrow X^3\Sigma_g^-$ (Шумана – Рунге)
	$X^3\Sigma_g^-$	0	

Представим силы осцилляторов молекул в виде

$$f(E_n, V_n, J_n \rightarrow E_m, V_m, J_m) = f_0(E_n, V_n \rightarrow E_m, V_m) S_{J_1 J_2} \quad (56)$$

Силы осцилляторов $f_0(E_n, V_n \rightarrow E_m, V_m)$ для перехода Шумана – Рунге молекулы O_2 приведены в таблице 8.

Таблица 8

Силы осцилляторов $f_0(E_n, V_n \rightarrow E_m, V_m)$

N	V_1	V_2	λ, nm	f_{12}	$E_1, \text{эВ}$	$E_2, \text{эВ}$	N	V_1	V_2	λ, nm	f_{12}	$E_1, \text{эВ}$	$E_2, \text{эВ}$
1	12	0	180.0	1.24E-03	0.000	7.928	203	11	17	312.7	4.79E-04	2.996	7.648
2	11	0	180.8	6.86E-04	0.000	7.648	204	3	14	315.9	1.45E-03	2.486	6.432
3	10	0	181.9	3.09E-04	0.000	7.407	205	10	17	316.0	7.74E-04	2.996	7.407
4	9	0	183.2	1.26E-04	0.000	7.201	206	5	15	316.2	1.57E-03	2.655	6.627
5	8	0	184.7	4.84E-05	0.000	7.025	207	1	13	316.4	9.63E-04	2.318	6.259
6	12	1	185.1	2.22E-03	0.193	7.928	208	7	16	317.4	1.18E-03	2.825	6.873
7	11	1	186.0	1.65E-03	0.193	7.648	209	9	17	320.0	4.25E-04	2.996	7.201
8	7	0	186.4	1.80E-05	0.000	6.873	210	12	18	321.8	1.51E-04	3.170	7.928
9	10	1	187.2	1.01E-03	0.193	7.407	211	4	15	322.2	1.03E-03	2.655	6.525
10	6	0	188.3	6.38E-06	0.000	6.742	212	2	14	322.4	2.24E-03	2.486	6.344
11	9	1	188.6	5.49E-04	0.193	7.201	213	6	16	322.8	2.64E-04	2.825	6.742
12	8	1	190.2	2.77E-04	0.193	7.025	214	0	13	323.4	5.68E-03	2.318	6.173
13	5	0	190.3	2.10E-06	0.000	6.627	215	11	18	324.5	1.61E-06	3.170	7.648
14	12	2	190.5	3.06E-03	0.383	7.928	216	8	17	324.7	8.34E-07	2.996	7.025
15	11	2	191.5	2.83E-03	0.383	7.648	217	10	18	328.1	2.47E-04	3.170	7.407
16	7	1	192.0	1.30E-04	0.193	6.873	218	3	15	328.7	1.12E-04	2.655	6.432
17	4	0	192.4	6.27E-07	0.000	6.525	219	5	16	328.8	3.61E-04	2.825	6.627
18	10	2	192.7	2.19E-03	0.383	7.407	220	1	14	329.5	1.45E-05	2.486	6.259
19	6	1	194.0	5.75E-05	0.193	6.742	221	7	17	329.9	7.02E-04	2.996	6.873
20	9	2	194.2	1.50E-03	0.383	7.201	222	9	18	332.4	8.48E-04	3.170	7.201
21	3	0	194.7	1.63E-07	0.000	6.432	223	12	19	334.1	4.12E-04	3.346	7.928
22	8	2	195.9	9.38E-04	0.383	7.025	224	4	16	335.3	1.80E-03	2.825	6.525
23	5	1	196.1	2.32E-05	0.193	6.627	225	6	17	335.7	1.29E-03	2.996	6.742
24	12	3	196.2	2.60E-03	0.570	7.928	226	2	15	335.8	2.54E-03	2.655	6.344
25	11	3	197.2	3.18E-03	0.570	7.648	227	11	19	337.0	4.90E-04	3.346	7.648
26	2	0	197.2	3.37E-08	0.000	6.344	228	0	14	337.1	5.50E-03	2.486	6.173
27	7	2	197.8	5.44E-04	0.383	6.873	229	8	18	337.4	7.10E-04	3.170	7.025
28	4	1	198.4	8.32E-06	0.193	6.525	230	10	19	340.9	1.54E-04	3.346	7.407
29	10	3	198.5	3.20E-03	0.570	7.407	231	5	17	342.2	1.79E-04	2.996	6.627
30	1	0	199.8	4.94E-09	0.000	6.259	232	3	16	342.4	4.18E-04	2.825	6.432
31	6	2	199.9	2.89E-04	0.383	6.742	233	7	18	343.1	1.06E-05	3.170	6.873
32	9	3	200.1	2.78E-03	0.570	7.201	234	1	15	343.5	5.34E-04	2.655	6.259
33	3	1	200.8	2.55E-06	0.193	6.432	235	9	19	345.5	7.16E-05	3.346	7.201
34	8	3	201.9	2.16E-03	0.570	7.025	236	12	20	347.0	2.26E-05	3.526	7.928
35	12	4	202.1	1.19E-03	0.755	7.928	237	4	17	349.2	8.26E-04	2.996	6.525
36	5	2	202.2	1.39E-04	0.383	6.627	238	6	18	349.4	7.72E-04	3.170	6.742
37	0	0	202.6	3.79E-10	0.000	6.173	239	2	16	350.0	1.34E-03	2.825	6.344
38	11	4	203.2	2.12E-03	0.755	7.648	240	11	20	350.2	3.14E-04	3.526	7.648
39	2	1	203.4	6.16E-07	0.193	6.344	241	8	19	350.9	8.18E-04	3.346	7.025
40	7	3	203.9	1.52E-03	0.570	6.873	242	0	15	351.8	4.62E-03	2.655	6.173
41	10	4	204.5	2.95E-03	0.755	7.407	243	10	20	354.4	6.97E-04	3.526	7.407
42	4	2	204.6	5.86E-05	0.383	6.525	244	5	18	356.4	1.28E-03	3.170	6.627
43	6	3	206.1	9.68E-04	0.570	6.742	245	3	17	356.9	1.70E-03	2.996	6.432

44	9	4	206.2	3.39E-03	0.755	7.201	246	7	19	357.1	8.53E-04	3.346	6.873
45	1	1	206.2	1.04E-07	0.193	6.259	247	1	16	358.4	1.96E-03	2.825	6.259
46	3	2	207.2	2.09E-05	0.383	6.432	248	9	20	359.4	3.95E-04	3.526	7.201
47	8	4	208.1	3.34E-03	0.755	7.025	249	12	21	360.7	2.48E-04	3.710	7.928
48	12	5	208.2	5.51E-05	0.936	7.928	250	6	19	363.9	1.16E-06	3.346	6.742
49	5	3	208.5	5.52E-04	0.570	6.627	251	4	18	364.0	2.21E-07	3.170	6.525
50	0	1	209.2	9.19E-09	0.193	6.173	252	11	21	364.1	3.98E-05	3.710	7.648
51	11	5	209.4	4.40E-04	0.936	7.648	253	2	17	365.2	1.32E-04	2.996	6.344
52	2	2	210.0	5.82E-06	0.383	6.344	254	8	20	365.3	1.63E-05	3.526	7.025
53	7	4	210.3	2.92E-03	0.755	6.873	255	0	16	367.5	3.34E-03	2.825	6.173
54	10	5	210.9	1.24E-03	0.936	7.407	256	10	21	368.6	1.40E-04	3.710	7.407
55	4	3	211.1	2.73E-04	0.570	6.525	257	5	19	371.5	1.15E-03	3.346	6.627
56	6	4	212.6	2.26E-03	0.755	6.742	258	7	20	371.9	8.79E-04	3.526	6.873
57	9	5	212.6	2.25E-03	0.936	7.201	259	3	18	372.4	1.87E-03	3.170	6.432
58	1	2	213.0	1.13E-06	0.383	6.259	260	9	21	374.1	7.51E-04	3.710	7.201
59	3	3	213.9	1.13E-04	0.570	6.432	261	1	17	374.3	3.19E-03	2.996	6.259
60	8	5	214.7	3.14E-03	0.936	7.025	262	12	22	375.1	2.95E-04	3.899	7.928
61	12	6	214.7	3.59E-04	1.115	7.928	263	11	22	378.8	5.06E-04	3.899	7.648
62	5	4	215.2	1.54E-03	0.755	6.627	264	6	20	379.3	7.98E-04	3.526	6.742
63	11	6	215.9	1.13E-04	1.115	7.648	265	4	19	379.8	8.13E-04	3.346	6.525
64	0	2	216.1	1.13E-07	0.383	6.173	266	8	21	380.4	5.53E-04	3.710	7.025
65	2	3	216.9	3.64E-05	0.570	6.344	267	2	18	381.5	2.73E-04	3.170	6.344
66	7	5	216.9	3.63E-03	0.936	6.873	268	10	22	383.7	2.23E-04	3.899	7.407
67	10	6	217.5	8.29E-06	1.115	7.407	269	0	17	384.2	2.10E-03	2.996	6.173
68	4	4	218.0	9.04E-04	0.755	6.525	270	5	20	387.6	1.04E-04	3.526	6.627
69	9	6	219.3	3.63E-04	1.115	7.201	271	7	21	387.6	2.66E-05	3.710	6.873
70	6	5	219.5	3.57E-03	0.936	6.742	272	3	19	388.9	7.23E-04	3.346	6.432
71	1	3	220.0	8.13E-06	0.570	6.259	273	9	22	389.6	5.19E-05	3.899	7.201
72	3	4	220.9	4.37E-04	0.755	6.432	274	12	23	390.3	2.35E-06	4.094	7.928
73	12	7	221.4	9.26E-04	1.292	7.928	275	1	18	391.4	3.47E-03	3.170	6.259
74	8	6	221.5	1.24E-03	1.115	7.025	276	11	23	394.4	1.63E-04	4.094	7.648
75	5	5	222.2	3.01E-03	0.936	6.627	277	6	21	395.7	1.14E-03	3.710	6.742
76	11	7	222.7	1.06E-03	1.292	7.648	278	8	22	396.5	8.16E-04	3.899	7.025
77	0	3	223.4	9.28E-07	0.570	6.173	279	4	20	396.6	1.66E-03	3.526	6.525
78	7	6	223.9	2.42E-03	1.115	6.873	280	2	19	398.9	1.52E-03	3.346	6.344
79	2	4	224.1	1.63E-04	0.755	6.344	281	10	23	399.7	6.23E-04	4.094	7.407
80	10	7	224.4	7.77E-04	1.292	7.407	282	0	18	402.2	1.13E-03	3.170	6.173
81	4	5	225.1	2.14E-03	0.936	6.525	283	7	22	404.4	5.32E-04	3.899	6.873
82	9	7	226.4	2.73E-04	1.292	7.201	284	5	21	404.7	3.81E-04	3.710	6.627
83	6	6	226.6	3.46E-03	1.115	6.742	285	9	23	406.1	3.91E-04	4.094	7.201
84	1	4	227.5	4.21E-05	0.755	6.259	286	12	24	406.4	3.22E-04	4.296	7.928
85	3	5	228.3	1.24E-03	0.936	6.432	287	3	20	406.6	0.00E+00	3.526	6.432
86	12	8	228.5	3.44E-04	1.467	7.928	288	1	19	409.7	2.84E-03	3.346	6.259
87	8	7	228.7	0.00E+00	1.292	7.025	289	11	24	410.8	1.25E-04	4.296	7.648
88	5	6	229.5	3.93E-03	1.115	6.627	290	6	22	413.2	2.06E-04	3.899	6.742
89	11	8	229.8	8.79E-04	1.467	7.648	291	8	23	413.6	5.13E-05	4.094	7.025
90	0	4	231.1	5.56E-06	0.755	6.173	292	4	21	414.6	1.01E-03	3.710	6.525
91	7	7	231.3	3.89E-04	1.292	6.873	293	10	24	416.5	6.16E-05	4.296	7.407
92	10	8	231.6	1.42E-03	1.467	7.407	294	2	20	417.5	2.61E-03	3.526	6.344
93	2	5	231.7	5.51E-04	0.936	6.344	295	0	19	421.6	5.25E-04	3.346	6.173
94	4	6	232.7	3.60E-03	1.115	6.525	296	7	23	422.1	1.00E-03	4.094	6.873
95	9	8	233.8	1.53E-03	1.467	7.201	297	5	22	422.9	1.34E-03	3.899	6.627
96	6	7	234.1	1.54E-03	1.292	6.742	298	12	25	423.4	1.60E-04	4.505	7.928
97	1	5	235.3	1.67E-04	0.936	6.259	299	9	24	423.5	6.94E-04	4.296	7.201

98	12	9	235.9	5.79E-05	1.639	7.928	300	3	21	425.5	6.97E-04	3.710	6.432
99	3	6	236.1	2.60E-03	1.115	6.432	301	11	25	428.1	4.78E-04	4.505	7.648
100	8	8	236.2	1.05E-03	1.467	7.025	302	1	20	429.4	1.84E-03	3.526	6.259
101	5	7	237.2	3.01E-03	1.292	6.627	303	8	24	431.6	4.19E-04	4.296	7.025
102	11	9	237.3	1.38E-05	1.639	7.648	304	6	23	431.7	2.26E-04	4.094	6.742
103	7	8	239.0	3.00E-04	1.467	6.873	305	4	22	433.8	5.92E-05	3.899	6.525
104	0	5	239.2	2.56E-05	0.936	6.173	306	10	25	434.3	3.03E-04	4.505	7.407
105	10	9	239.2	3.50E-04	1.639	7.407	307	2	21	437.4	2.72E-03	3.710	6.344
106	2	6	239.7	1.41E-03	1.115	6.344	308	7	24	441.0	2.07E-04	4.296	6.873
107	4	7	240.6	4.04E-03	1.292	6.525	309	12	26	441.2	6.04E-05	4.722	7.928
108	9	9	241.5	1.09E-03	1.639	7.201	310	9	25	441.9	4.10E-05	4.505	7.201
109	6	8	242.0	1.98E-05	1.467	6.742	311	5	23	442.4	1.02E-03	4.094	6.627
110	1	6	243.6	5.14E-04	1.115	6.259	312	0	20	442.4	2.08E-04	3.526	6.173
111	12	10	243.6	6.58E-04	1.810	7.928	313	3	22	445.7	1.92E-03	3.899	6.432
112	8	9	244.1	1.77E-03	1.639	7.025	314	11	26	446.3	5.20E-05	4.722	7.648
113	3	7	244.2	3.95E-03	1.292	6.432	315	1	21	450.5	9.52E-04	3.710	6.259
114	11	10	245.2	5.73E-04	1.810	7.648	316	8	25	450.8	8.53E-04	4.505	7.025
115	5	8	245.4	8.45E-04	1.467	6.627	317	6	24	451.5	1.14E-03	4.296	6.742
116	7	9	247.1	1.76E-03	1.639	6.873	318	10	26	453.1	5.51E-04	4.722	7.407
117	10	10	247.2	2.06E-04	1.810	7.407	319	4	23	454.2	3.90E-04	4.094	6.525
118	0	6	247.7	9.48E-05	1.115	6.173	320	2	22	458.8	2.01E-03	3.899	6.344
119	2	7	248.1	2.76E-03	1.292	6.344	321	12	27	459.9	3.43E-04	4.948	7.928
120	4	8	249.0	2.60E-03	1.467	6.525	322	7	25	461.0	2.05E-04	4.505	6.873
121	9	10	249.7	4.40E-06	1.810	7.201	323	9	26	461.4	3.89E-04	4.722	7.201
122	6	9	250.4	9.05E-04	1.639	6.742	324	5	24	463.2	8.97E-05	4.296	6.627
123	12	11	251.8	3.46E-04	1.980	7.928	325	0	21	464.9	6.97E-05	3.710	6.173
124	1	7	252.3	1.26E-03	1.292	6.259	326	11	27	465.5	2.46E-04	4.948	7.648
125	8	10	252.5	4.66E-04	1.810	7.025	327	3	23	467.3	2.41E-03	4.094	6.432
126	3	8	252.8	4.12E-03	1.467	6.432	328	8	26	471.1	1.37E-04	4.722	7.025
127	11	11	253.4	8.04E-04	1.980	7.648	329	6	25	472.5	8.93E-04	4.505	6.742
128	5	9	253.9	5.04E-05	1.639	6.627	330	10	27	472.9	1.60E-05	4.948	7.407
129	10	11	255.6	1.10E-03	1.980	7.407	331	1	22	473.2	4.03E-04	3.899	6.259
130	7	10	255.6	1.47E-03	1.810	6.873	332	4	24	476.2	1.56E-03	4.296	6.525
131	0	7	256.7	2.83E-04	1.292	6.173	333	12	28	479.6	4.14E-05	5.185	7.928
132	2	8	257.0	4.08E-03	1.467	6.344	334	2	23	481.8	1.12E-03	4.094	6.344
133	4	9	257.8	5.11E-04	1.639	6.525	335	9	27	481.9	6.89E-04	4.948	7.201
134	9	11	258.2	8.25E-04	1.980	7.201	336	7	26	482.2	1.02E-03	4.722	6.873
135	6	10	259.1	2.07E-03	1.810	6.742	337	5	25	485.3	3.30E-04	4.505	6.627
136	12	12	260.3	3.96E-05	2.149	7.928	338	11	28	485.7	4.10E-04	5.185	7.648
137	8	11	261.2	1.93E-04	1.980	7.025	339	0	22	489.2	1.95E-05	3.899	6.173
138	1	8	261.5	2.46E-03	1.467	6.259	340	3	24	490.6	1.92E-03	4.296	6.432
139	3	9	261.9	2.55E-03	1.639	6.432	341	8	27	492.5	2.65E-04	4.948	7.025
140	11	12	262.1	3.20E-05	2.149	7.648	342	10	28	493.7	3.98E-04	5.185	7.407
141	5	10	262.9	1.41E-03	1.810	6.627	343	6	26	494.8	5.10E-05	4.722	6.742
142	10	12	264.4	4.36E-04	2.149	7.407	344	1	23	497.7	1.37E-04	4.094	6.259
143	7	11	264.6	7.60E-05	1.980	6.873	345	4	25	499.6	2.15E-03	4.505	6.525
144	0	8	266.3	7.00E-04	1.467	6.173	346	12	29	500.1	1.86E-04	5.434	7.928
145	2	9	266.4	4.37E-03	1.639	6.344	347	9	28	503.5	4.75E-05	5.185	7.201
146	4	10	267.1	1.64E-04	1.810	6.525	348	7	27	504.7	6.80E-04	4.948	6.873
147	9	12	267.2	1.11E-03	2.149	7.201	349	2	24	506.5	4.81E-04	4.296	6.344
148	6	11	268.3	1.04E-03	1.980	6.742	350	11	29	506.8	9.01E-07	5.434	7.648
149	12	13	269.3	5.50E-04	2.318	7.928	351	5	26	508.9	1.46E-03	4.722	6.627
150	8	12	270.4	1.32E-03	2.149	7.025	352	8	28	515.1	9.47E-04	5.185	7.025
151	11	13	271.2	4.55E-04	2.318	7.648	353	0	23	515.4	4.50E-06	4.094	6.173

152	1	9	271.2	3.83E-03	1.639	6.259	354	3	25	515.4	1.09E-03	4.505	6.432
153	3	10	271.5	5.22E-04	1.810	6.432	355	10	29	515.5	5.02E-04	5.434	7.407
154	5	11	272.4	2.14E-03	1.980	6.627	356	6	27	518.5	4.23E-04	4.948	6.742
155	10	13	273.7	1.05E-04	2.318	7.407	357	12	30	521.5	2.77E-04	5.694	7.928
156	7	12	274.1	6.49E-04	2.149	6.873	358	1	24	524.1	3.76E-05	4.296	6.259
157	2	10	276.3	3.10E-03	1.810	6.344	359	4	26	524.6	1.72E-03	4.722	6.525
158	0	9	276.4	1.47E-03	1.639	6.173	360	9	29	526.2	3.92E-04	5.434	7.201
159	9	13	276.7	6.68E-05	2.318	7.201	361	7	28	528.5	1.98E-06	5.185	6.873
160	4	11	276.9	1.63E-03	1.980	6.525	362	11	30	528.7	3.94E-04	5.694	7.648
161	6	12	278.1	1.44E-06	2.149	6.742	363	2	25	533.1	1.59E-04	4.505	6.344
162	12	14	278.7	2.33E-04	2.486	7.928	364	5	27	534.0	1.96E-03	4.948	6.627
163	8	13	280.1	7.60E-04	2.318	7.025	365	10	30	538.2	0.00E+00	5.694	7.407
164	11	14	280.8	6.43E-04	2.486	7.648	366	8	29	538.9	3.98E-04	5.434	7.025
165	1	10	281.5	4.68E-03	1.810	6.259	367	3	26	542.1	4.49E-04	4.722	6.432
166	3	11	281.7	1.20E-04	1.980	6.432	368	6	28	543.6	1.52E-03	5.185	6.742
167	5	12	282.5	7.97E-04	2.149	6.627	369	0	24	543.7	8.38E-07	4.296	6.173
168	10	14	283.4	8.88E-04	2.486	7.407	370	9	30	549.9	8.03E-04	5.694	7.201
169	7	13	284.0	1.49E-03	2.318	6.873	371	4	27	551.3	9.25E-04	4.948	6.525
170	9	14	286.7	5.30E-04	2.486	7.201	372	1	25	552.7	8.11E-06	4.505	6.259
171	2	11	286.9	1.06E-03	1.980	6.344	373	7	29	553.5	6.75E-04	5.434	6.873
172	0	10	287.1	2.58E-03	1.810	6.173	374	5	28	560.7	1.46E-03	5.185	6.627
173	4	12	287.2	2.21E-03	2.149	6.525	375	2	26	561.7	4.02E-05	4.722	6.344
174	6	13	288.3	1.02E-03	2.318	6.742	376	8	30	563.8	6.67E-05	5.694	7.025
175	12	15	288.7	7.60E-05	2.655	7.928	377	6	29	570.1	1.79E-03	5.434	6.742
176	8	14	290.4	1.72E-05	2.486	7.025	378	3	27	570.7	1.35E-04	4.948	6.432
177	11	15	290.9	9.53E-06	2.655	7.648	379	0	25	574.5	1.21E-07	4.505	6.173
178	3	12	292.4	1.50E-03	2.149	6.432	380	7	30	579.8	1.69E-03	5.694	6.873
179	1	11	292.4	4.36E-03	1.980	6.259	381	4	28	579.8	3.40E-04	5.185	6.525
180	5	13	293.1	3.19E-05	2.318	6.627	382	1	26	583.5	1.32E-06	4.722	6.259
181	10	15	293.7	3.61E-04	2.655	7.407	383	5	29	588.9	6.81E-04	5.434	6.627
182	7	14	294.6	4.32E-04	2.486	6.873	384	2	27	592.4	7.47E-06	4.948	6.344
183	9	15	297.2	9.72E-04	2.655	7.201	385	6	30	598.1	1.12E-03	5.694	6.742
184	2	12	298.0	3.00E-06	2.149	6.344	386	3	28	601.3	2.88E-05	5.185	6.432
185	4	13	298.2	8.76E-04	2.318	6.525	387	0	26	607.8	1.29E-08	4.722	6.173
186	0	11	298.4	3.90E-03	1.980	6.173	388	4	29	610.1	8.48E-05	5.434	6.525
187	12	16	299.1	4.87E-04	2.825	7.928	389	1	27	616.7	1.55E-07	4.948	6.259
188	6	14	299.2	1.49E-03	2.486	6.742	390	5	30	618.8	2.01E-04	5.694	6.627
189	8	15	301.2	9.40E-04	2.655	7.025	391	2	28	625.4	9.62E-07	5.185	6.344
190	11	16	301.5	4.55E-04	2.825	7.648	392	3	29	633.9	4.08E-06	5.434	6.432
191	3	13	303.8	2.42E-03	2.318	6.432	393	4	30	642.2	1.33E-05	5.694	6.525
192	1	12	304.0	2.83E-03	2.149	6.259	394	0	27	644.0	9.51E-10	4.948	6.173
193	5	14	304.3	1.18E-03	2.486	6.627	395	1	28	652.6	1.19E-08	5.185	6.259
194	10	16	304.6	1.08E-04	2.825	7.407	396	2	29	660.8	7.66E-08	5.434	6.344
195	7	15	305.7	1.63E-04	2.655	6.873	397	3	30	668.7	3.37E-07	5.694	6.432
196	9	16	308.3	8.63E-05	2.825	7.201	398	0	28	683.2	4.03E-11	5.185	6.173
197	2	13	309.8	7.84E-04	2.318	6.344	399	1	29	691.2	4.80E-10	5.434	6.259
198	4	14	309.9	7.50E-06	2.486	6.525	400	2	30	698.6	2.93E-09	5.694	6.344
199	12	17	310.2	1.10E-04	2.996	7.928	401	0	29	725.7	0.00E+00	5.434	6.173
200	0	12	310.5	5.07E-03	2.149	6.173	402	1	30	732.7	0.00E+00	5.694	6.259
201	6	15	310.7	2.88E-04	2.655	6.742	403	0	30	771.5	0.00E+00	5.694	6.173
202	8	16	312.6	8.25E-04	2.825	7.025							

3.7. Результаты численного моделирования

На рис. 1 приведена сводка экспериментальных данных спектрального распределения интенсивности излучения при различных скоростях ударной волны. На рис. 2 показаны расчёты спектрального распределения интенсивности излучения. При скоростях больше 6.5 км/с наблюдаются интенсивные атомные линии кислорода. При более низких скоростях ударной волны расчёт сильно занижает интенсивность излучения в видимой области по сравнению с экспериментом. Это значит, что в видимой и ближней инфракрасной областях при малых скоростях ударной волны есть излучатели, которые не были учтены в расчётах.

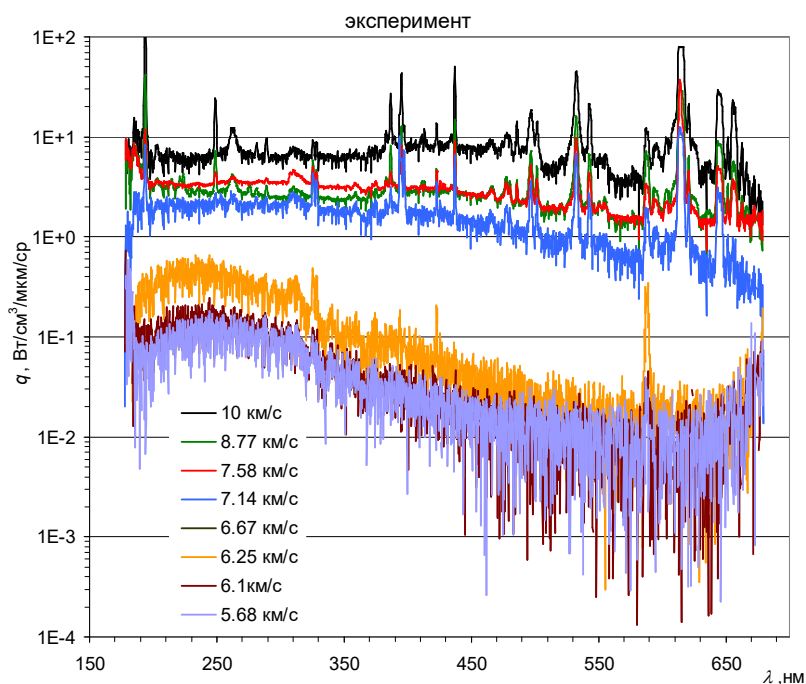


Рис. 1. Сводка экспериментальных данных по излучению в ударной волне чистого кислорода при различных скоростях ударной волны

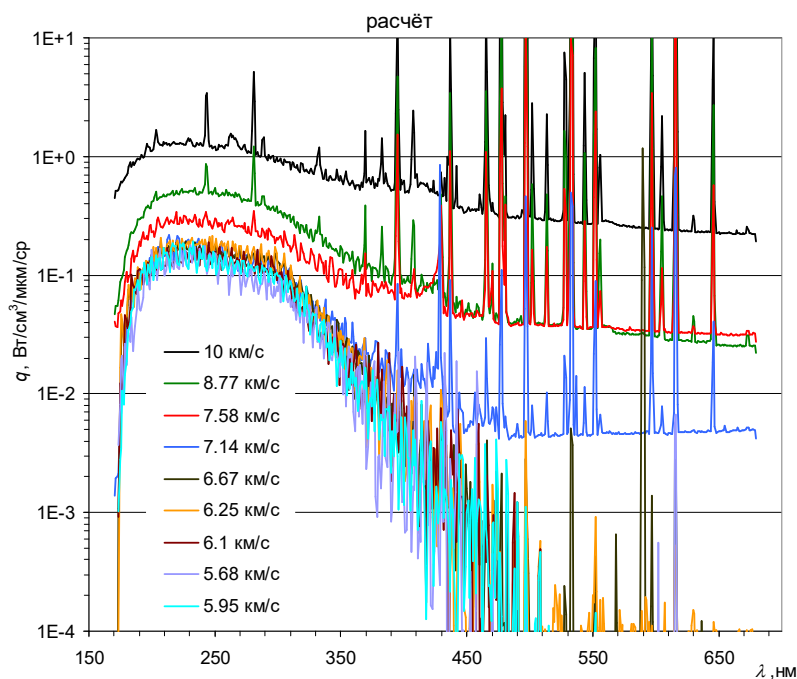


Рис. 2. Сводка расчётных данных по излучению в ударной волне чистого кислорода при различных скоростях ударной волны

Наибольшая скорость, которая была достигнута в экспериментальных исследованиях была 10 км/с. Сравнение расчётного и экспериментального спектра представлено на рис. 3. Слева показан спектр от 150 до 700 нм, справа более подробно показан спектр от 170 до 350 нм. Видно, что некоторые расчётные линии смещены относительно экспериментальных, что может быть связано с неточным определением энергии термов в расчётах. Относительные интенсивности линий (отношение интенсивностей разных линий в расчёте или интенсивностей разных линий в эксперименте) в эксперименте и расчёте разные, что можно объяснить неточностью определения сил осцилляторов и сечений возбуждения электронных уровней. Некоторые сильные линии связаны с излучением атомарного водорода, который не учитывался в расчётах. Как показывают оценки, даже концентрации H $X(\text{H}) \sim 10^{-4}$ дают заметный вклад в панорамный спектр. Водород может появляться, например, из адсорбированной на стенках ударной трубы воды.

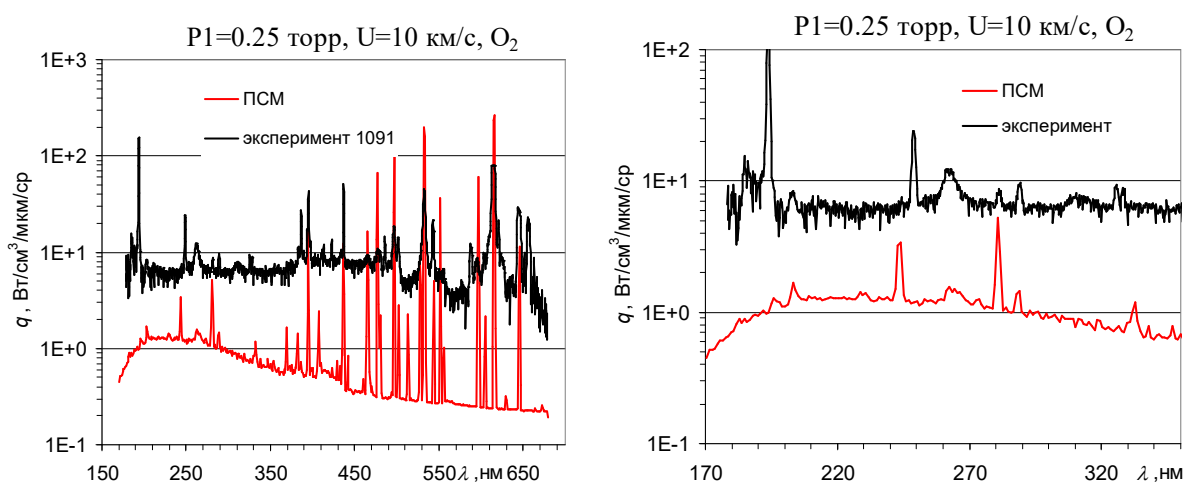


Рис. 3. Сравнение расчётных и экспериментальных данных по спектральному распределению интенсивности излучения при различном масштабе спектральной шкалы для скорости ударной волны 10 км/с

Излучение отдельных компонент для ударной волны со скоростью 10 км/с приведено на рис. 4. В фиолетовой области спектра основной вклад даёт молекула O_2 , в красной области – атомы O . Вклад ионов O_2^+ и O^+ минимальный.

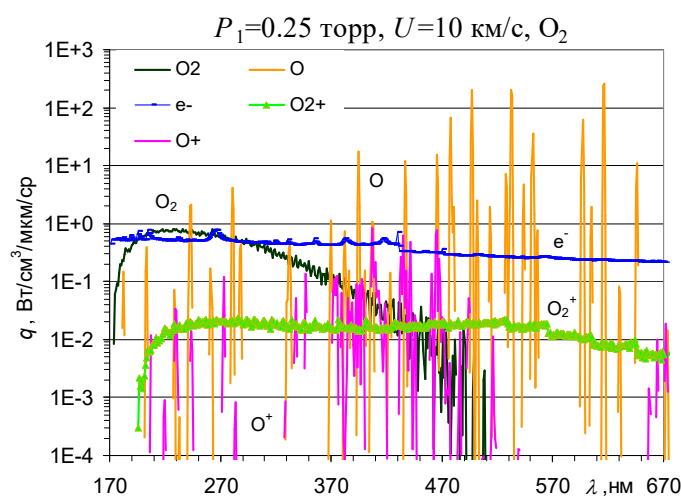


Рис. 4. Сравнение расчётных и экспериментальных данных по спектральному распределению интенсивности излучения для скорости ударной волны 10 км/с

Излучение, обусловленное наличием электронов (тормозное излучение и фоторекомбинация) дают заметный вклад в видимой области. В экспериментах линии имеют явно большее уширение, чем в расчётах. Панорамные спектры получены усреднением полной интенсивности за ударной волной по времени. Большие экспериментальные уширения линий могут быть связаны с этим усреднением.

Помимо панорамных спектров были получены временные зависимости интенсивности для узких спектральных диапазонов. На рис. 5 приведено изменение интенсивности излучения в ударной волне на длине волны 213 ± 1.3 нм для скорости ударной волны 10 км/с. Расчётное излучение в 5 раз меньше и оно размазано на область перед ударной волной, что связано с тем, что в эксперименте измерительная аппаратура фокусируется на малую область с небольшим углом полураствора, в расчётах собирается излучение в половину телесного угла 2π . Невозможность уменьшения угла сбора излучения в расчётах связана с малым количеством собираемых фотонов. Для увеличения числа фотонов необходимо использование многопроцессорных компьютеров. В настоящее время проводится распараллеливание программы численного моделирования с использованием MPI.

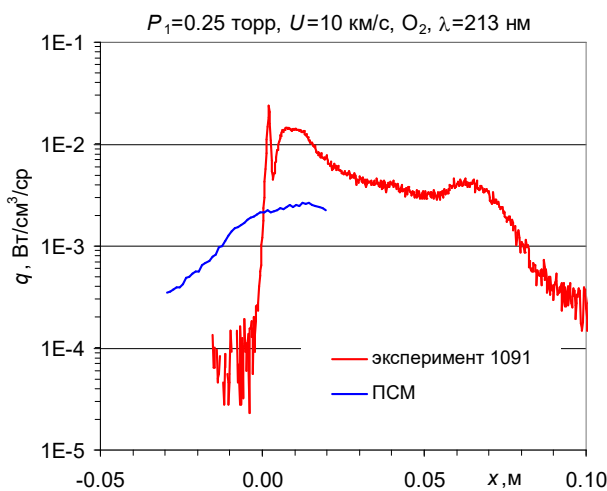


Рис. 5. Изменение интенсивности излучения в ударной волне на длине волны 213 нм для скорости ударной волны 10 км/с

Экспериментальный спектр излучения содержит много линий различных компонент, возможно, шум, связанный с неточностью калибровки системы по эталонным источникам с дискретным спектром излучения. Для выявления молекулярных полос полезно провести фильтрацию с помощью Фурье-фильтров, например, low-pass. На рис. 6 показан пример такого усреднения спектра.

На рис. 7 приведено сравнение расчётных и экспериментальных данных по спектральному распределению интенсивности излучения при различном масштабе спектральной шкалы для скорости ударной волны 6.1 км/с. На рис. 8 показано излучение отдельных компонентов смеси для скорости ударной волны 6.1 км/с. В диапазоне от 170 до 450 нм излучает молекула O_2 . На рис. 7, а видна структура полос O_2 . Как следует из рис. 7, б в диапазоне $450 \div 700$ нм есть излучатели, которые не учитываются в расчётах.

На рис. 9 приведено изменение интенсивности излучения в ударной волне на длине волны 213 ± 1.3 нм для скорости ударной волны 6.1 км/с.

На рис. 10 приведено сравнение расчётных и экспериментальных данных по спектральному распределению интенсивности излучения при различном масштабе спектральной шкалы для скорости ударной волны 6.25 км/с. Для скорости 6.25 км/с можно сделать те же выводы, что и для 6.1 км/с.

На рис. 11 показано излучение отдельных компонентов смеси для скорости ударной волны 6.25 км/с.

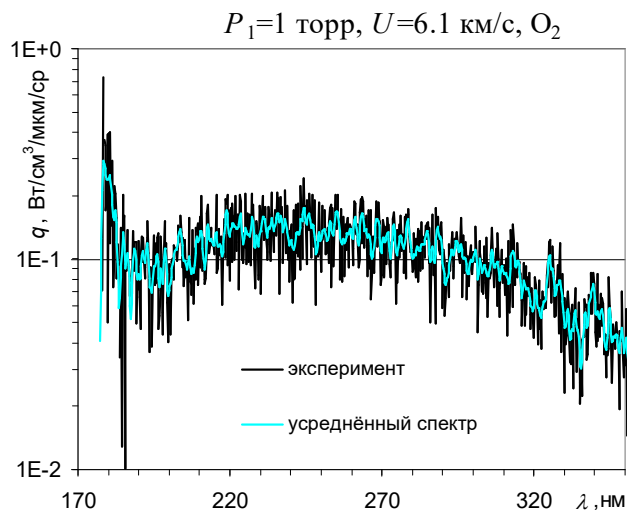


Рис. 6. Пример усреднения спектра

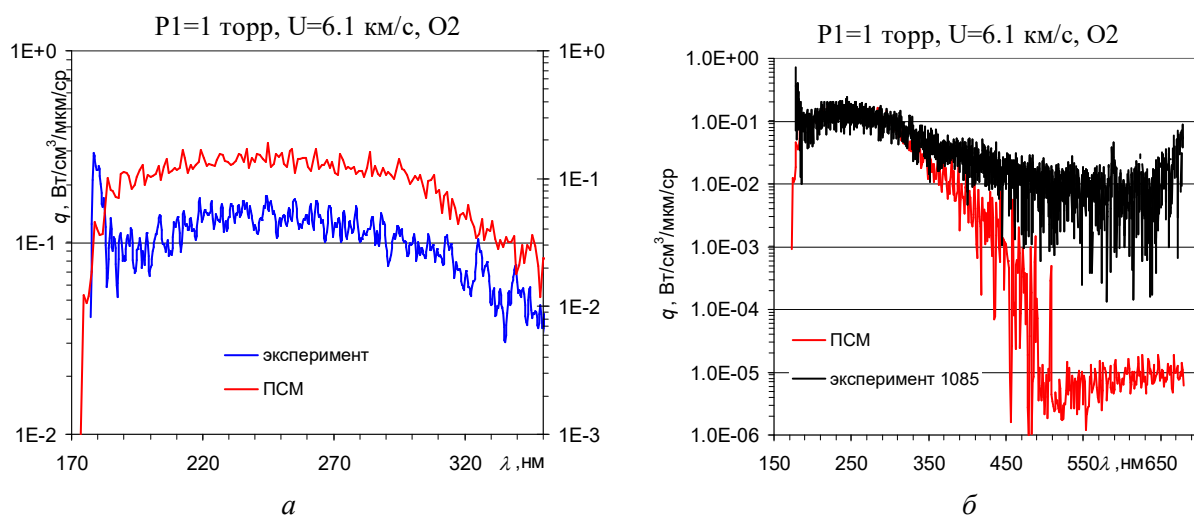


Рис. 7. Сравнение расчётных и экспериментальных данных по спектральному распределению интенсивности излучения при различном масштабе спектральной шкалы для скорости ударной волны 6.1 км/с

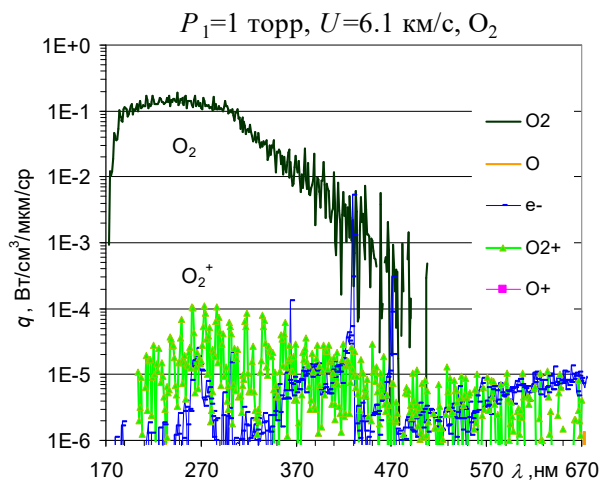


Рис. 8. Излучение отдельных компонентов смеси для скорости ударной волны 6.1 км/с

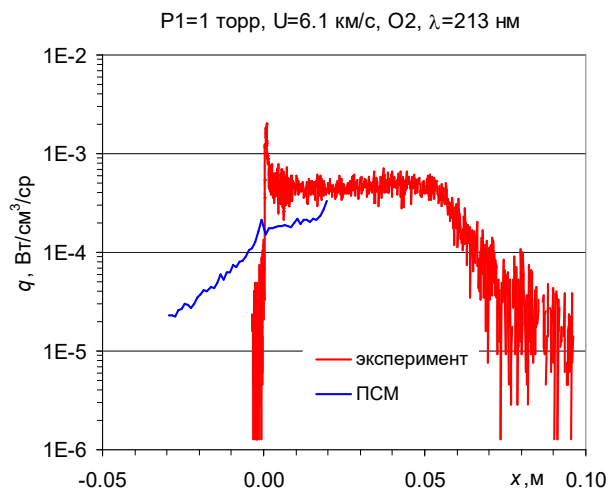


Рис. 9. Изменение интенсивности излучения в ударной волне на длине волны 213 нм

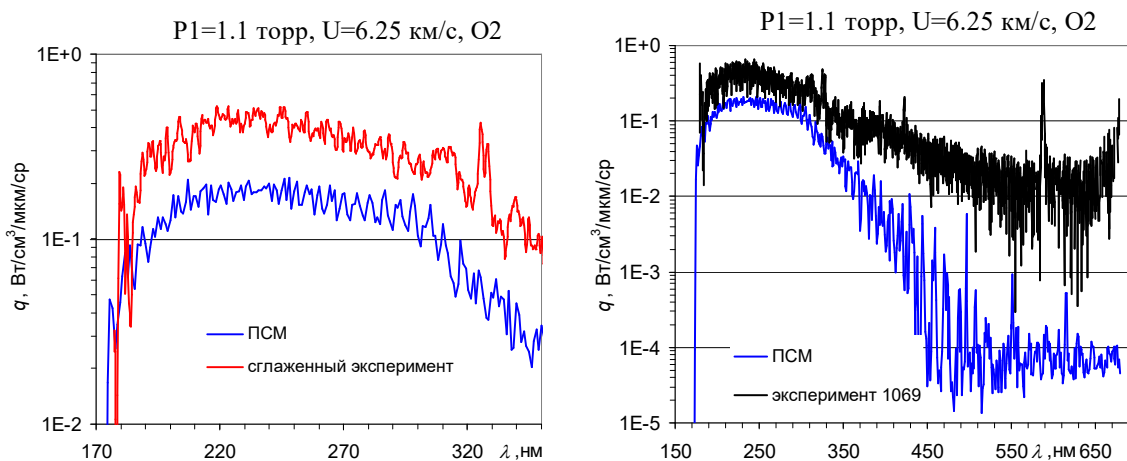


Рис. 10. Сравнение расчётных и экспериментальных данных по спектральному распределению интенсивности излучения при различном масштабе спектральной шкалы для скорости ударной волны 6.25 км/с

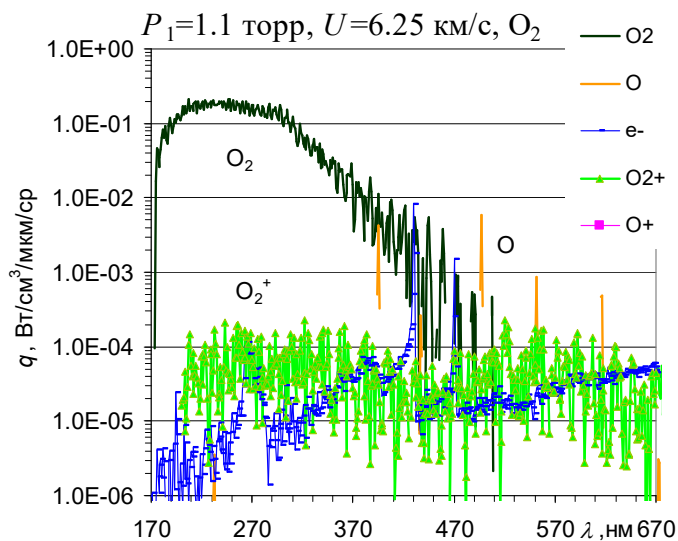


Рис. 11. Излучение отдельных компонентов смеси для скорости ударной волны 6.25 км/с

На рис. 12 приведено изменение интенсивности излучения в ударной волне на длине волны 213 ± 1.3 нм для скорости ударной волны 6.25 км/с.

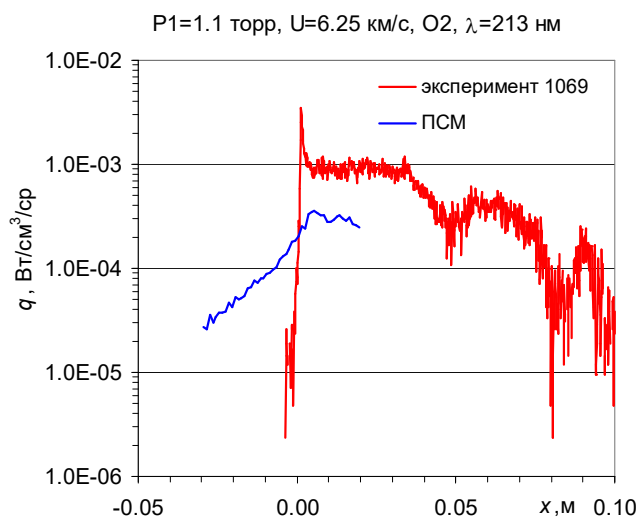


Рис. 12. Изменение интенсивности излучения в ударной волне на длине волны 213 нм

На рис. 13 приведена равновесная концентрация O_2 за ударной волной, вычисленное с использованием двух компьютерных программ: авторов данной работы и С.Т. Суржикова. Концентрации заметно расходятся лишь при скоростях ударной волны больших 7 км/с. При скорости ударной волны большей 6 км/с концентрация молекул O_2 начинает резко падать, одновременно начинает расти концентрация электронов как следует из рис. 14. Поэтому на рис. 1 и 2 в фиолетовой видимой области спектра при скоростях меньше 7 км/с излучение в основном связано с молекулами O_2 , а при больших скоростях с тормозным и фоторекомбинационным излучением, связанных с наличием электронов.

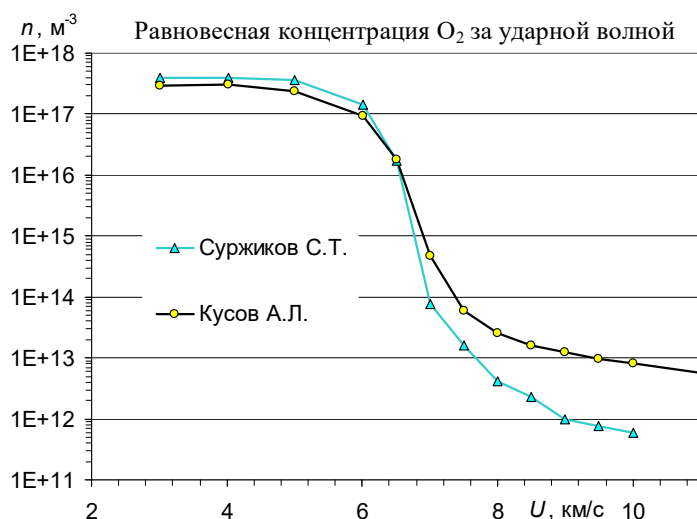


Рис. 13. Равновесная концентрация O_2 за ударной волной, вычисленное с использованием двух компьютерных программ

Равновесная температура за ударной волной приведена на рис. 15. При скоростях от 3 до 6 километров она меняется от 3000 до 4000 градусов, при скоростях более 6 км/с температура начинает расти более резко, достигая значения ~ 13000 К при скорости 10 км/с.

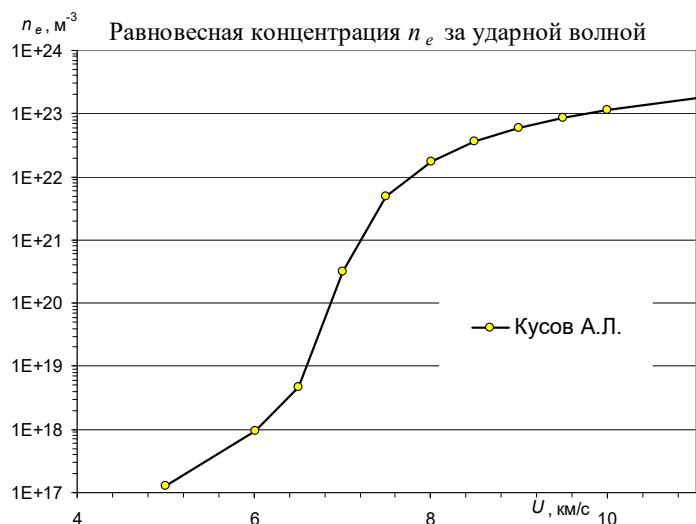


Рис. 14. Равновесная концентрация электронов за ударной волной

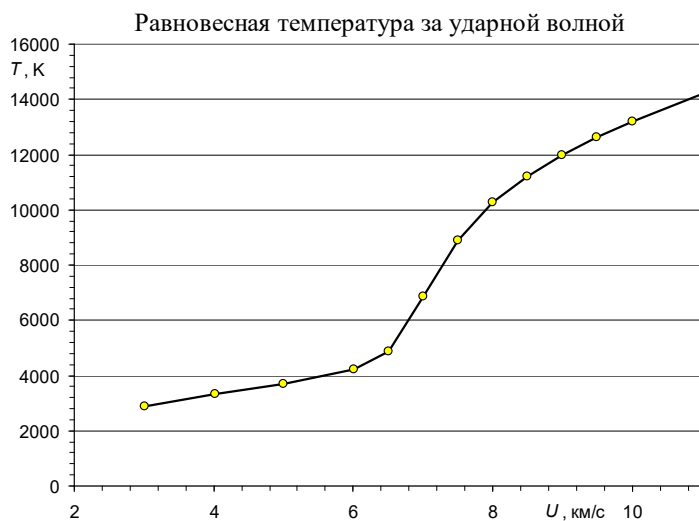


Рис. 15. Равновесная температура за ударной волной

Показатель адиабаты γ равновесного газа за ударной волной показан на рис. 16. Он меняется от 1.33 при 3000 К, выходит на максимум ~ 1.63 , близкому к показателю одноатомного газа $\gamma = 1.67$, далее падает из-за возбуждения электронных уровней атома O и иона O^+ .

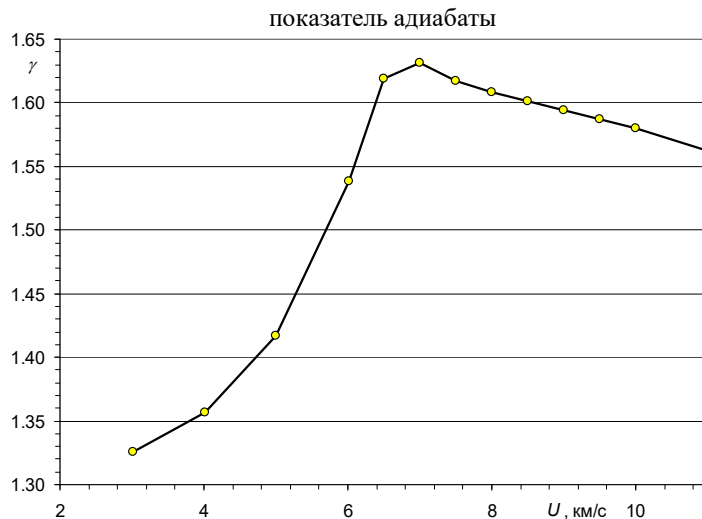


Рис. 16. Показатель адиабаты равновесного газа за ударной волной

4. Заключение

Представлена методика ПСМ, которая позволяет поводить расчет структуры ударной волны в кислороде, а также излучения в ней с учетом различных процессов: эволюции заселения возбужденных состояний атома аргона, ионизации, излучения в линиях атома и иона аргона, тормозного излучения, фото-ионизации и фото-рекомбинации. Результаты сравнения расчётов и экспериментов показывают, что выбранные модели приводят к качественно правильным результатам, однако параметры моделей нуждаются в дальнейшем уточнении.

Благодарности и ссылки на гранты

Работа выполнена в соответствии с планом исследований НИИ механики МГУ им. М.В. Ломоносова при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 20-08-00343 и № 18-08-00501).

Литература

1. Суржиков С.Т. Оптические свойства газов и плазмы. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2004, 576с.
2. “NIST: Atomic Spectra Database Lines Form.” [Online]. Available: https://www.physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/lines_form.html. [Accessed: 03-Jun-2019].
3. Радциг А.А., Смирнов Б.М. Справочник по атомной и молекулярной физике. М.: Атомиздат, 1980, 240 с.
4. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справочник. Т.1, книга 1 / Под ред. Глушко В.П., М.: Наука, 1978, 497 с.
5. Bird G., *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*, Oxford. Cl. 1994.
6. Parker J.G. Rotational and vibrational relaxation in diatomic gases // *Physics of Fluids*, Vol. 2, No 4, 1959, pp. 449–462.
7. Boyd I.D. Rotational and vibrational nonequilibrium effects in rarefied hypersonic flow // *J. Thermophysics*, 1990, Vol. 4, № 4, pp. 478–484.
8. Boyd I.D. Rotational-translational energy transfer in rarefied nonequilibrium flows // *Physics of Fluids A*, Vol. 2, No 3, 1990, pp. 447–452.
9. Суржиков 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/>
10. Суржиков 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/>
11. Соболев И.М., Численные методы Монте-Карло. Москва: Наука, 1973.
12. Бай Ши-и, Динамика излучающего газа. Москва: Мир, 1968.
13. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П., Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. Москва: Физматлит, 2008.
14. Кусов А.Л., Быкова Н.Г. Теоретические основы расчёта факторов Хёнля – Лондона двухатомных молекул//Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2022. Т. 23, вып. 1. <http://chemphys.edu.ru/issues/2022-23-1/articles/950/>

References

1. Surzhikov, S. T., *Opticheskie svojstva gazov i plazmy* (Optical properties of gases and plasma), M.: Izd-vo MGTU im. N. Je. Baumana, 2004, 576 p.
2. “NIST: Atomic Spectra Database Lines Form.” [Online]. Available: https://www.physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/lines_form.html. [Accessed: 03-Jun-2019].

3. Radcig, A. A., Smirnov, B. M. *Spravochnik po atomnoy i molekuliarnoy fizike* (Handbook of Atomic and Molecular Physics), M.: Atomizdat, 1980, 240 p.
4. *Termodinamicheskie svoystva individual'nyh veschestv: Spravochnik* (Thermodynamic properties of individual matters), Ed. by Glushko V. P., M.: Nauka, Vol. 1, No. 1, 1978, 497 p.
5. Bird, G., *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*, Oxford. Cl. 1994.
6. Parker, J. G., "Rotational and vibrational relaxation in diatomic gases," *Physics of Fluids*, Vol. 2, No. 4, 1959, pp. 449–462.
7. Boyd, I. D., "Rotational and vibrational nonequilibrium effects in rarefied hypersonic flow," *J. Thermophysics*, Vol. 4, No. 4, 1990, pp. 478–484.
8. Boyd, I. D., "Rotational-translational energy transfer in rarefied nonequilibrium flows," *Physics of Fluids A*, Vol. 2, No 3, 1990, pp. 447–452.
9. Surzhikov, S. T., "Introduction to the theory of the eRC-models of high-speed aerophysics. Electronic kinetics of diatomic molecules," *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, Vol. 22, No. 6, 2021. <http://chemphys.edu.ru/issues/2021-22-6/articles/968/>
10. Surzhikov, S. T., "Introduction to the Theory of the eRC-Models of High-Speed Aerophysics. The General Concepts," *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, Vol. 22, No. 6, 2021. <http://chemphys.edu.ru/issues/2021-22-6/articles/967/>
11. Sobol', I. M., *Chislennyye metody Monte-Carlo* (Monte Carlo Numerical Methods), Moskva: Nauka, 1973.
12. Shih-I. Pai, *Radiation Gas Dynamic*, Sprinder, 1966, 240 p.
13. Zel'dovich, Ya. B., Raizer, Yu. P., *Fizika udarnykh voln i vysokotemperaturnykh gidrodinamicheskikh yavleniy* (Physics of shock waves and high-temperature hydrodynamic phenomena), Moskva: Fizmatlit, 2008.
14. Kusov, A. L., Bikova, N. G., "Theoretical Basis of the Diatomic Molecules Hönl–London Factors Estimation," *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, Vol. 23, No. 1, 2022. <http://chemphys.edu.ru/issues/2022-23-1/articles/950/>

Статья поступила в редакцию 25 августа 2022 г.