

- [1] Данилов В. Н. // ПМТФ. 1968. № 5. С. 3—10.
- [2] Вялов Г. Н. // ЖТФ. 1976. Т. 46. Вып. 8. С. 1612—1616.
- [3] Рухадзе А. А., Богданкевич Л. С., Росинский С. Е., Рухлин В. Г. Физика сильноточных релятивистских электронных пучков. М.: Атомиздат, 1980. 166 с.
- [4] Девидсон Р. Теория заряженной плазмы. М.: Мир, 1978. 216 с.
- [5] Найфе А. Введение в методы возмущений. М.: Мир, 1984. 535 с.

Поступило в Редакцию  
1 августа 1988 г.

## О ВЛИЯНИИ ДВИЖЕНИЯ ГАЗА НА КИНЕТИКУ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ

В. Ю. Великодный

Течения газовых смесей с существенно различными массами компонентов могут сопровождаться значительными отличиями средних парциальных газодинамических скоростей и поступательных температур. Многотемпературные, многоскоростные режимы течений газовых смесей наблюдаются в ударных волнах [1], при истечении в вакуум [2], при течении в сопле Лавала в переходном режиме по числу Кнудсена [3]. Эти течения, причем осложненные физико-химическими превращениями, встречаются в различных технических приложениях. Их изучение возможно на основе многотемпературного, многоскоростного описания.

В настоящее время существует ряд подходов [4-8] к решению кинетических уравнений Больцмана для газовых смесей с существенно различными массами компонентов, приводящих к одинаковым по структуре и виду уравнениям многотемпературной, многоско-

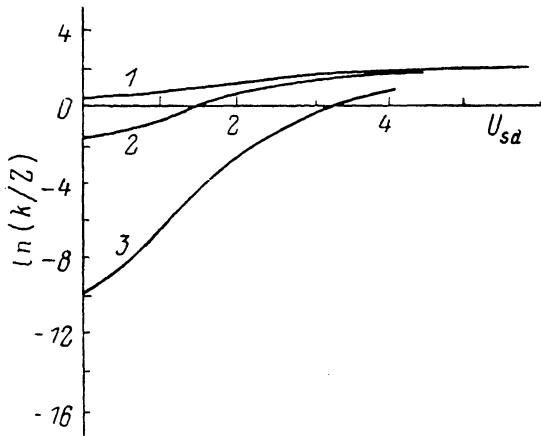


Рис. 1. Зависимость величин констант скоростей неравновесных химических реакций от разности средних парциальных скоростей частиц.

$k$  — константа скорости реакции  $Z = 1/2 p_{sd}^2 \times \times \Omega^{(1,1)}$  — фактор столкновений,  $U_{sd}$  — безразмерная разность средних парциальных скоростей;  $E_{sd}^*$ : 1 — 0, 2 — 2, 3 — 10.

ростной газодинамики и одинаковым коэффициентам переноса. Обоснование и исследование областей применимости этих уравнений дано в [3, 5, 7].

Современное понимание явлений в газовой смеси обязано концепции «epochal relaxation» Грэда [4]. Согласно этой концепции, легкие и тяжелые компоненты смеси дают разные времена релаксации. Так, в [4-6] рассматривалась следующая иерархия времен релаксации:  $\tau_0 \gg \tau_{i \neq j} \gg \tau_{ii}$ ,  $\tau_0$  — характерное гидродинамическое время,  $\tau_{ij}$  — времена релаксации за счет упругих столкновений молекул. Это позволяет продвинуться в область больших чисел Кнудсена ( $Kn \ll \sqrt{m_i/m_j}$ , где  $m_i, m_j$  — массы легкого и тяжелого компонентов), чем это позволяет метод Чепмена—Энскога, в котором  $\tau_0 \gg \tau_{i \neq j} \sim \tau_{ii}$ .

Метод моментов Грэда [8, 9] решения кинетических уравнений с выбором в качестве нулевого приближения локально-максвелловской функции распределения относительно средних парциальных скоростей и температур и использование основных идей [10] при распространении этого метода на случай протекания физико-химических превращений приводят к уравнениям многотемпературной, многоскоростной газодинамики. При получении этих уравнений неявно полагается, что  $\tau_0 \sim \tau_R \gg \tau_{i \neq j} \gg \tau_{ii}$ ,  $\tau_R$  — время протекания физико-

химических превращений. Последнее условие для времен релаксации использовалось в работе [11] при выводе уравнений многотемпературной газодинамики ( $u_i = u_j$ , где средние парциальные скорости компонентов  $i$  и  $j$ ) методом [6].

При получении замкнутой системы уравнений переноса в данной работе с целью проведения количественных оценок для упругих столкновений молекул принята модель «твердые сферы». Для неупругих и химических реакций, так же как и в [12], предполагается пороговый механизм и принята модель типа «реагирующие твердые сферы». Соотношения между временами релаксации процессов  $\tau_0 \sim \tau_{\mathbf{R}} \gg \tau_{i \neq j} \gg \tau_i$ , налагают достаточно жесткие условия на параметры газовой смеси [11]. Для того чтобы иметь возможность использовать реагенты в их стехиометрических соотношениях, в смеси должны присутствовать химически инертные разбавители.

Уравнения переноса для парциальных концентраций в приближении пяти моментов, либо, что то же самое, в нулевом приближении метода [6], имеют вид

$$\frac{\partial n_s}{\partial t} + \frac{\partial (n_s u_s^z)}{\partial r_\alpha} = \frac{1}{2} \sum_{a, b, d} \{k_{ab}^{sd} n_a n_b - k_{ab}^{da} n_s n_d\}, \quad (1)$$

где  $n_s$ ,  $u_s^z$  — парциальные концентрация и скорость соответственно,  $k_{sd}^{ab}$ ,  $k_{ab}^{sd}$  — константы скоростей прямой и обратной реакций.

В (1), как и в [12], частицы, обладающие различными внутренними состояниями и одинаковой химической природой, рассматриваются как отдельные компоненты газовой смеси. Выражение для константы скорости неравновесной реакции имеет вид

$$k_{sd}^{ab} = 4 p_{sd}^{ab} \Omega_{sd}^{(1,1)} \left\{ \frac{\sqrt{\pi}}{4} \left( U_{sd} + \frac{1}{2U_{sd}} - \frac{E_{sd}^*}{U_{sd}} \right) [\operatorname{erf}(\sqrt{E_{sd}^*} + U_{sd}) - \operatorname{erf}(\sqrt{E_{sd}^*} - U_{sd})] + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \exp(-U_{sd}^2 - E_{sd}^*) \left[ \operatorname{ch}(2U_{sd} \sqrt{E_{sd}^*}) + \frac{\sqrt{E_{sd}^*}}{U_{sd}} \operatorname{sh}(2U_{sd} \sqrt{E_{sd}^*}) \right] \right\}, \quad (2)$$

где  $p_{sd}^{ab}$  — стерический фактор,  $\Omega_{sd}^{(1,1)}$  — омега-интеграл Чепмена—Каулинга [13],  $T_{sd}^* = \mu_{sd} T_d + \mu_{ds} T_s$  — эффективная температура,  $\mu_{sd} = m_s / (m_s + m_d)$ ,  $m_s$  — масса частиц сорта  $s$ ,  $E_{sd}^* = E_{sd}^{ab} / (kT_{sd}^*)$  — приведенная энергия активации,  $U_{sd}^2 = ((u_s - u_d)^2 m_s \mu_{ds}) / (2kT_{sd}^*)$ .

При достаточно больших  $U_{sd} \gg 1$  имеем значительное отклонение от закона Аррениуса. Большие значения  $U_{sd} \gg 1$ , как уже указывалось выше, наблюдаются при течении газовых смесей в сопле Лавала при определенных условиях [3]. Для  $U_{sd} \rightarrow 0$  имеем обычную аррениусовскую зависимость для константы скорости реакции. На рис. 1 представлена зависимость константы скорости реакции от значений величины  $U_{sd}$ . Можно показать (и это видно из графика), что при достаточно больших  $U_{sd}$  константа скорости реакции практически не зависит от ее энергии активации.

Уравнения переноса импульса и парциальных температур имеют следующую структуру [11]:

$$\rho_s \frac{du_s^z}{dt} + \frac{\partial P_s}{\partial r_\alpha} = \sum_{\nu \neq s} A_{\nu s}^{\nu s} (0) + \frac{1}{2} \sum_{a, b, d} A_{ds}^{ab} (0), \quad (3)$$

$$\frac{3}{2} k n_s \frac{dT_s}{dt} + P_s \frac{\partial u_s^z}{\partial r_\alpha} = \sum_{\nu \neq s} B_{\nu s}^{\nu s} (0) + \frac{1}{2} \sum_{a, b, d} B_{ds}^{ab} (0), \quad (4)$$

где  $P_s$  — парциальное давление,  $\rho_s$  — парциальная плотность.

Выражения для членов  $A_{\nu s}^{\nu s} (0)$ ,  $B_{\nu s}^{\nu s} (0)$ , описывающих перенос импульса и энергии с учетом только упругих столкновений, приведены в [14]. Выражения для членов  $A_{ds}^{ab} (0)$ ,  $B_{ds}^{ab} (0)$ , описывающих перенос импульса и энергии за счет столкновений, приводящих к физико-химическим превращениям, имеют достаточно сложный и громоздкий вид. Так как далее нас будет интересовать влияние только газодинамических параметров на кинетику химических реакций, то для этих целей возможны упрощенные постановки конкретных задач, решения которых будут приведены ниже, где нет необходимости учета  $A_{ds}^{ab} (0)$  и  $B_{ds}^{ab} (0)$  в (3), (4). Поэтому в данной работе явный вид  $A_{ds}^{ab} (0)$  и  $B_{ds}^{ab} (0)$  приводить не будем.

Для иллюстрации рассмотрим течения в сопле Лавала при различных числах Кнудсена в переходном режиме. Для упрощения численных расчетов предположим, что реагенты составляют малую примесь к химически инертным разбавителям (99 % He и 1 % Ar), такую, чтобы энерговыделение реакции не оказывало существенного влияния на параметры потока. Рас-

считаются реакции, в которых исходные реагенты существенно отличаются по массам. Геометрия сопла такая же, как и в [8]. Числа Кнудсена оцениваются по отношению длины свободного пробега в форкамере к характерному размеру в критическом сечении. Воспользуемся (2) при вычислении констант скоростей реакций. На рис. 2 приведены зависимости отношения констант скоростей неравновесных реакций  $k_2$  к константе скорости  $k_1$  в области форкамеры от координаты сопла при различных числах Кнудсена и значения безразмерной энергии активации в области форкамеры  $E_{sd}^* = 1$ . Значения  $X^* = 0$  соответствуют критическому сечению. В то время как эффективная температура в области критического сечения резко падает, величина константы скорости реакции может даже превысить ее равновесные значения в области форкамеры. Согласно (2), это объясняется наличием гиперзвуковых значений  $U_{sd} > 1$ .

В частности, аналогичные эффекты наблюдаются и в ударных волнах, причем последние обнаружены и экспериментально [15]. Расчеты на основе численных методов Монте-Карло

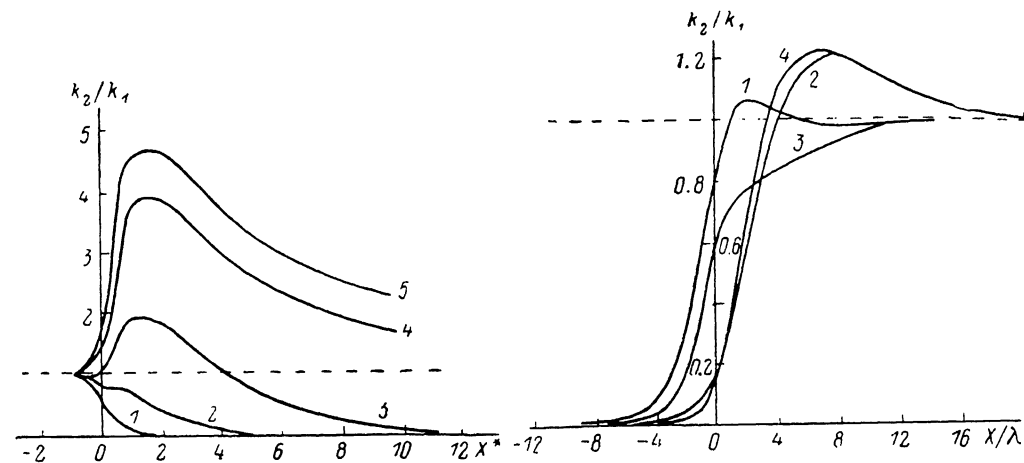


Рис. 2. Зависимость отношений констант скоростей неравновесных реакций к константам их скорости в форкамере от координаты сопла при различных числах Кнудсена и безразмерной энергии активации в области форкамеры  $E_{sd}^* = 1$ .

Кл: 1 — 0.005, 2 — 0.065, 3 — 0.105, 4 — 0.155, 5 — 0.175;  $k_2$  — константа скорости неравновесных реакций,  $k_1$  — константа скорости реакции в области форкамеры,  $X^*$  — координата сопла.

Рис. 3. Изменение отношения констант скоростей реакций в профиле ударной волны к их значениям за ударной волной.

$k_2$  — константа скорости во фронте ударной волны,  $k_1$  — константа скорости в равновесии за ударной волной,  $X$  — координата профиля ударной волны,  $\lambda$  — длина свободного пробега.

приводят к тем же результатам для ударных волн [16]. Для описания ударных волн уже недостаточно лямбдамоментного приближения, а необходимо либо учитывать последующие приближения, либо использовать другие подходы к решению кинетических уравнений [7]. Отметим в связи с этим, что (2) имеет более широкий смысл, так как формально многотемпературное, многоскоростное описание может быть использовано не только для смесей с различием в массах частиц. Так, в методе Мотт—Смита решения уравнения Больцмана аппроксимирующая функция распределения представляет комбинацию из двух максвеллианов, характеризующихся разными средними парциальными параметрами. Применение метода Мотт—Смита для описания ударных волн с химическими реакциями приводит к уравнениям для концентраций частиц с правой частью, аналогичной (1). Автором были проведены расчеты структуры ударной волны при наличии реакций, исходными реагентами которых являются только «тяжелые» компоненты смеси либо «легкие» и «тяжелые». Реагенты составляют малую примесь к химически инертным разбавителям ( $N_{Xc} : N_{He} = 0.015$ ). Энергия активации прямой реакции, рассчитанная в области до скачка,  $E_{sd}^* = 5$ . Предполагается, что прямая реакция имеет малую величину стерического фактора, а обратная — большое значение энергии активации. Число Маха  $M = 3.61$ . На рис. 3 для сравнения представлены профили отношений неравновесных констант скорости к равновесным их значениям за ударной волной. Для реакционных столкновений типа «тяжелая»—«тяжелая» частицы данные, рассчитанные на основе (2), представлены кривой 2, а по формуле Аррениуса — кривой 4, для реакционных столкновений типа «тяжелая»—«легкая» данные, рассчитанные на основе (2), представлены кривой 1,

а на основе формулы Аррениуса — кривой 3. Расчеты для ударных волн в данной работе дают картину поведения констант элементарных реакций, качественно согласующуюся с результатами [15, 16].

### Список литературы

- [1] *Gmuresyk A. S., Tarczynski M., Walenta Z. A.* // Rarefied Gas Dynamics. New York: Pergamon Press, 1979. Vol. 1. P. 333—341.
- [2] *Takahashi N., Moriga T., Teshima K.* // Rarefied Gas Dynamics. New York: Pergamon Press, 1986. Vol. 1. P. 939—950.
- [3] *Mitra N. K., Fiebig M.* // Rarefied Gas Dynamics. Tokyo, 1984. Vol. 2. P. 655—664.
- [4] *Grad H.* // Rarefied Gas Dynamics. New York: Pergamon Press, 1960. Vol. 3. P. 100—138.
- [5] *Johnson E. A.* // Transport theory and statistical physics. 1975. Vol. 4. N 1—4. P. 37—48.
- [6] *Галкин В. С., Коган М. Н., Макашев Н. К.* // ДАН СССР. 1975. Т. 220. № 2. С. 304—307.
- [7] *Hamel V. B.* // Progress in Astronautics and Aeronautics. Philadelphia: Drexel University, 1977. Vol. 51. Pt 1. P. 171—195.
- [8] *Жданов В. М.* Явления переноса в многокомпонентной плазме. М.: Энергоиздат, 1982. 176 с.
- [9] *Великодный В. Ю., Маркеев Б. М.* // ЖТФ. 1981. Т. 51. Вып. 1. С. 192—196.
- [10] *Жданов В. М., Скачков П. П.* // МЖГ. 1974. № 4. С. 125—132.
- [11] *Бузыкин О. Г., Макашев Н. К.* // ПМТФ. 1981. № 1. С. 87—94.
- [12] *Алексеев Б. В.* Математическая кинетика реагирующих газов. М.: Наука, 1982. 420 с.
- [13] *Ферцигер Дж., Капер Г.* Математическая теория процессов переноса в газах. М.: Мир, 1976. 554 с.
- [14] *Burgers J. M.* Flow Equations for Composite Gases. New York, 1969. 332 p.
- [15] *Генич А. П., Каспаров Г. Г., Манелис Г. В., Панов Н. В.* // Молекулярная газодинамика. Новосибирск, 1980. С. 11—21.
- [16] *Bird G. A.* // Rarefied Gas Dynamics. Tokyo, 1984. Vol. 1. P. 175—182.

Московский физико-технический институт  
Долгопрудный Московской обл.

Поступило в Редакцию  
1 сентября 1988 г.  
В окончательной редакции  
5 апреля 1989 г.

01; 10

Журнал технической физики, т. 59, в. 12, 1989

## АСИММЕТРИЯ УГЛОВОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПЛОСКОКАНАЛИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ МЭВ-НЫХ ЭНЕРГИЙ

С. В. Дабагов

В работах, посвященных исследованию ориентационных эффектов, сопровождающих плоскостное каналирование легких заряженных частиц, обычно ограничиваются рассмотрением угловых распределений пролетающих частиц в направлении, перпендикулярном атомной плоскости кристалла. Не менее интересным, однако, является вопрос о полном угловом распределении частиц с глубиной проникновения в кристалл и о соотношении между распределениями частиц в параллельной и поперечной плоскостях (по отношению к плоскости каналирования).

Рассмотрим моноэнергетический пучок электронов с определенной начальной расходимостью  $\Delta\varphi < \varphi_p$  ( $\varphi_p$  — критический угол плоскостного каналирования), падающий на кристалл параллельно кристаллографической плоскости. Выберем декартову систему координат с началом в точке вхождения частиц в кристалл. Ось  $t$  направим вдоль первоначального направления движения пучка, плоскость  $ty$  расположим параллельно атомной плоскости, углы рассеяния частицы в параллельной  $ty$  и поперечной  $tz$  плоскостях обозначим соответственно  $\theta_{\parallel}$  и  $\theta_{\perp}$ .

При плоскостном каналировании функцию поперечного углового распределения электронов (перпендикулярно плоскости каналирования) можно определить следующим образом:

$$F(\theta_{\perp}, t) = \sum_n P_n(t) |\psi_n(k\theta_{\perp})|^2 k, \quad (1)$$

где  $\psi_n(k\theta_{\perp}) = \int dx \psi_n(x) \exp(-ik\theta_{\perp}x)$  — волновая функция  $n$ -го состояния в импульсном представлении,  $k$  — импульс пролетающей частицы; суммирование ведется по всем состояниям подбарьерного движения.