

этому является экспериментальный факт уменьшения протяженности зоны рециркуляции при вдуве воздуха ($M_\infty=3,05$) и падение донного давления, начиная с некоторого расхода вдуваемого гелия ($\bar{G}>0,75\%$), как это видно на рис. 5.

Поступила в редакцию
14/X 1974

ЛИТЕРАТУРА

1. К. Е. Юрченко. Изв. АН СССР, МЖГ, 1971, 2, 98.
2. L. R. Davis. AIAA J., 1968, 6, 5, 843.
3. L. H. Townend, J. Reid. In: Supersonic Flow, Chemical Processes and Radiative Transfer. Oxford and others, 1964, p. 137.
4. F. R. Ham a. AIAA J., 1968, 6, 2, 212.
5. А. И. Швец. Изв. АН СССР, МЖГ, 1972, 6, 61.
6. S. Weinbaum. J. Fluid Mech., 1968, 33, 1, 39.
7. I. F. Nash. Aeronout. Res. Council Rep. and Mem., 1963, № 3344.

УДК 541.127

РАСЧЕТ КОНСТАНТ СКОРОСТИ ТРЕХЧАСТИЧНОЙ РЕКОМБИНАЦИИ

Ю. Г. Коробейников
(Новосибирск)

В различных областях химической физики и высокотемпературной газодинамики важным является вопрос о надежном определении скорости процесса трехчастичной рекомбинации. Основные существующие подходы к решению этого вопроса изложены в [1—4].

В настоящей работе предпринята попытка расчета констант скорости рекомбинации (КСР), основанного на использовании обобщенных кинетических уравнений. Это позволяет рассматривать задачу на достаточно надежной основе, а предлагаемая аппроксимация трехчастичной рекомбинации (интеграл столкновений трех частиц с рекомбинацией) дает возможность довольно просто получать конкретные результаты по константам скорости, что является важным для практических применений.

Кинетическая модель для расчета скорости трехчастичной рекомбинации

Рассмотрим однородную многокомпонентную смесь газов без внешних сил, в которой наряду с бинарными имеют место и трехчастичные столкновения. Пусть также оба вида столкновений будут как упругими, так и неупругими и, кроме того, могут проходить с химическими превращениями.

Будем изучать процессы в такой системе с помощью одночастичных функций распределения (ФР) $f_{\alpha(i)} \equiv f_{\alpha(i)}(\bar{p}_\alpha, \chi_i, t)$, зависящих от импульса $\bar{p}_\alpha$ частицы химического сорта α , набора χ_i , описывающего внутреннее состояние i , и времени t . Тогда систему обобщенных кинетических

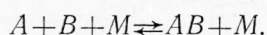
тических уравнений для введенных ФР можно представить в следующем структурном виде

$$\frac{df_{\alpha(i)}}{dt} = I_{\alpha(i)}^{(b,y)} + I_{\alpha(i)}^{(b,n)} + I_{\alpha(i)}^{(b,x)} + I_{\alpha(i)}^{(t,y)} + I_{\alpha(i)}^{(t,n)} + I_{\alpha(i)}^{(t,x)}. \quad (1)$$

Здесь индексы б, т, у, н, х при интегралах столкновений означают соответственно бинарные, тройные, упругие, неупругие и «химические» столкновения. Проинтегрируем (1) по $\bar{p}_{\alpha}$ и просуммируем по всем i -состояниям. Учитывая определение плотности числа частиц сорта α $n_{\alpha} = \sum_i \int f_{\alpha(i)} d\bar{p}_{\alpha}$, получим

$$\frac{dn_{\alpha}}{dt} = \sum_i \int \{I_{\alpha(i)}^{(b,x)} + I_{\alpha(i)}^{(t,x)}\} d\bar{p}_{\alpha}. \quad (2)$$

Рассмотрим реакцию трехчастичной рекомбинации



В феноменологической химической кинетике выражение для скорости образования вещества A обычно записывают в виде

$$dn_A/dt = K_d n_{AB} \cdot n_M - K_r n_A n_B n_M, \quad (3)$$

где K_d и K_r определяются соответственно как константа скорости диссоциации и константа трехчастичной рекомбинации. Для дальнейшего сравнения с экспериментальными результатами и с результатами других расчетов констант реакций целесообразно (2) представить в обычном виде (3). Это приводит к следующему определению константы скорости рекомбинации и константы диссоциации через интегралы столкновений

$$K_r = \frac{\sum_i \int I_{A(i)}^{(b,x)} d\bar{p}_A}{n_A n_B n_M}, \quad K_d = \frac{\sum_i \int I_{A(i)}^{(b,x)} d\bar{p}_A}{n_{AB} n_M}. \quad (4)$$

Необходимо отметить, что в неравновесном случае «константы» (4) кроме обычной зависимости от температуры могут зависеть от плотности и времени.

Для дальнейшего продвижения в вычислении КСР необходимо знание структуры трехчастичного интеграла столкновений с химическими превращениями. Подобные интегралы столкновений, строго говоря, следует получать из основных принципов статистической механики (из уравнения Лиувилля для N -частичной ФР или для матрицы плотности). Однако такие интегралы были бы мало полезны для действительного вычисления КСР. Целесообразно использовать несколько упрощенные (с точки зрения основных принципов) модели для трехчастичных интегралов столкновений. Такие модели, сохраняя основные черты процесса рекомбинации, должны позволить доводить результаты по константам скорости до численных значений.

Динамически процесс рекомбинации проходит следующим образом [1, 4]. Два рекомбинирующих атома в процессе взаимодействия сближаются друг с другом, образуя так называемую квазимолекулу (переходную пару). Третья частица, вступая во взаимодействие с квазимолекулой, способствует стабилизации рекомбинирующих атомов, т.е. образованию конечного связанного состояния. Эта естественная схема процесса может быть выражена в предлагаемой аппроксимации трехчастичного интеграла столкновений.

Проводя рассуждения, какие обычно проводятся при физическом выводе интеграла столкновений Больцмана [5, 6], можно показать, что число столкновений в единичном объеме, в единицу времени молекул A с ФР $f_{A(i)}$ с молекулами $f_{B(j)}$ со всеми возможными значениями импульса, приводящие к образованию квазимолекулы, может быть записано в следующем виде

$$\int f_{A(i)}(\bar{p}_A, \chi_i, t) f_{B(j)}(\bar{p}_B, \chi_j, t) \frac{|\bar{p}_B - \bar{p}_A|}{\mu_{AB}} \sigma_{(i,j)} d\bar{p}_B. \quad (5)$$

Здесь μ_{AB} — приведенная масса молекул A и B , $\sigma_{(i,j)}$ — сечение процесса образования квазимолекулы.

Выражение (5) описывает бимолекулярный процесс образования переходных пар. Далее необходимо учесть стабилизирующее влияние третьей молекулы. Строго говоря, задача о трехчастичной рекомбинации требует общего решения динамической задачи трех тел, что в настоящее время невыполнимо.

Возможно статистическое описание влияния третьего тела. Действительно, за «время жизни» квазимолекулы в любой случайный момент времени третье тело M может оказаться в области взаимодействия с рекомбинирующими частицами A и B . Таким образом можно вычислить вероятность образования в момент времени трехчастичного взаимодействующего комплекса $A-B-M$. Такая вероятность может быть получена с помощью так называемой радиальной ФР [6]. Предположим, что влияние третьей стабилизирующей частицы M , находящейся в квантовом состоянии (l) , на рекомбинирующие атомы можно учесть умножением сечения $\sigma_{(i,j)}$ в выражении (5) на величину

$$(R_{M(l)} e^{\Phi_{AB}/kT} - 1). \quad (6)$$

Здесь $R_{M(l)}(r, t)$ — радиальная ФР с учетом взаимодействия с третьей частицей M ; r — относительное расстояние; Φ_{AB} — потенциал взаимодействия частиц A и B ; T — температура; k — постоянная Больцмана. Вычисление этой величины следует производить на характеристическом расстоянии r_{AB} , входящем в потенциал взаимодействия Φ_{AB} .

Просуммировав по всем состояниям j, l , получим выражение для трехчастичного интеграла соударений, дающего изменения со временем ФР в результате трехчастичной рекомбинации

$$I_{A(i)}^{(T,x)} = \sum_{j,l} \int (R_{M(l)} e^{\Phi_{AB}/kT} - 1) f_{A(i)}(\bar{p}_A, \chi_i, t) f_{B(j)}(\bar{p}_B, \chi_j, t) \times \\ \times g_{AB} \sigma_{(i,j)} d\bar{p}_B. \quad (7)$$

Здесь $g_{AB} = |\bar{p}_B - \bar{p}_A|/\mu_{AB}$ — модуль относительной скорости сталкивающихся частиц A и B .

Такая аппроксимация точного интеграла, очевидно, не может описать тонкие детали динамики химического столкновения. Однако есть основание полагать, что основные свойства процесса будут учтены верно. Действительно, при дезактивации квазимолекулы третьему телу M передается энергия $\leq kT$. Это означает, что образуется молекула AB с сильно возбужденным колебательным состоянием. Из теории колебательно-поступательных переходов следует, что вероятность дезактивации для состояний вблизи диссоциационного предела будет сравнима с единицей, с другой стороны она должна переходить в пределе в вероятность дезактивации квазимолекулы [4]. Таким образом, не будет существенной переоценки числа рекомбинирующих пар при достаточно низких температурах, при которых узкое место в многоступенчатом реком-

бинационном процессе расположено вблизи порога диссоциации. Однако следует считать, что вопрос о точности рассматриваемой аппроксимации может быть решен только при разностороннем сравнении результатов с экспериментальными данными.

Из выражения КСР (4) с учетом (7) имеем

$$K_r = \sum_{i,j,l} (n_A n_B n_M)^{-1} \int \int (R_{M(l)} e^{\Phi_{AB}/kT} - 1) f_{A(i)}(\bar{p}_A, \chi_i, t) \times \\ \times f_{B(j)}(\bar{p}_B, \chi_j, t) g_{AB} \sigma_{(i,j)} d\bar{p}_A d\bar{p}_B. \quad (8)$$

Соотношение (8) связывает КСР с одночастичными ФР рекомбинирующих атомов, радиальной ФР и с двухчастичным сечением образования переходной пары. Характерная особенность выражения (8) состоит в том, что оно позволяет рассчитывать константу рекомбинации без действительного решения задачи трех тел.

Введем некоторые определения и упрощающие предположения. Пусть одночастичные ФР не зависят от внутренних состояний атомов. Тогда, обозначая просуммированные по всем внутренним состояниям l радиальную ФР и по состояниям i, j сечение соответственно через

$$R_M = \sum_l R_{M(l)}, \quad \sigma'(g_{AB}) = \sum_{i,j} \sigma_{i,j},$$

получим из (8)

$$K_r = \frac{(R_M e^{\Phi_{AB}/kT} - 1)}{n_A n_B n_M} \int \int f_A(\bar{p}_A, t) f_B(\bar{p}_B, t) g_{AB} \sigma' d\bar{p}_A d\bar{p}_B. \quad (9)$$

Степенной потенциал притяжения

Рассмотрим случай, когда можно принять равновесное распределение по импульсам. Тогда, переходя к переменной энергии относительного движения $E = \mu_{AB} g_{AB}^2 / 2$, из (9) имеем

$$K_r = \frac{8\pi}{\mu_{AB}^2} \left(\frac{\mu_{AB}}{2\pi kT} \right)^{3/2} \frac{(R_M e^{\Phi_{AB}/kT} - 1)}{n_M} \int_0^\infty e^{-E/kT} E \sigma'(E) dE. \quad (10)$$

Будем считать, что рекомбинирующие частицы A и B взаимодействуют друг с другом согласно степенному потенциалу притяжения. Тогда можно записать эффективную потенциальную энергию A и B с учетом центробежного отталкивания [4]

$$\Phi_{\text{эф}} = -\frac{2\gamma}{v} \left(\frac{r_{AB}}{r} \right)^v + \frac{Eb^2}{r^2}, \quad (11)$$

где b — прицельный параметр. В точке z $\Phi_{\text{эф}}$ равно максимальному значению E_6 . Понятно, что образование связанной пары AB в результате рекомбинации может произойти лишь тогда, когда относительной энергии E достаточно, чтобы преодолеть потенциальный барьер E_6 . В этом случае будет образовываться квазимолекула $(AB)'$. Таким образом, вычисление сечения образования квазимолекулы $(AB)'$ $\sigma'(g)$ заключается в определении при данной начальной энергии E значения прицельного параметра b_{max} , при котором величина барьера E_6 в точке z равна данному E . Ясно, что для определенного E при $b \leq b_{\text{max}}$ образование

$(AB)'$ возможно. Тогда для $\sigma'(g)$ имеем

$$\sigma'(g_{AB}) = 2\pi \int_0^{b_{\max}} b db = \pi b_{\max}^2. \quad (12)$$

Для рассматриваемого потенциала (11) находим z из уравнения

$$\frac{d\varphi_{\text{эф}}}{dr} = 0, \quad z = \left(\frac{\gamma r_{AB}^v}{Eb^2} \right)^{1/v-2}.$$

Из уравнения $\varphi_{\text{эф}}(z) = E$ находим $b_{\max}$

$$b_{\max} = \left(\frac{v}{v-2} \right)^{\frac{v-2}{2v}} \left(\frac{\gamma}{E} \right)^{1/v} r_{AB}. \quad (13)$$

Далее, используя (13), (12) и (10) находим КСР

$$K_r = (2\pi)^{1/2} \cdot 2^{\frac{v-2}{v}} \cdot \left(\frac{v}{v-2} \right)^{\frac{v-2}{v}} \cdot \Gamma\left(\frac{2v-2}{v}\right) \mu_{AB}^{-1/2} r_{AB}^2 (2\gamma)^{2/v} \times \\ \times \frac{(R_M e^{\varphi_{AB}/kT} - 1)}{n_M} (kT)^{\frac{v-4}{2v}}.$$

Здесь Γ — гамма-функция. В качестве конкретных задач в дальнейшем будем интересоваться рекомбинацией одинаковых атомов. Предположим, что стабилизирующая частица взаимодействует с рекомбинирующими частицами по закону твердых сфер и используем литературные данные для R_M [5]¹, тогда имеем

$$K_r = \frac{(2\pi)^{3/2}}{24} \cdot \left(\frac{v}{v-2} \right)^{\frac{v-2}{v}} \cdot \Gamma\left(\frac{2v-2}{v}\right) \mu^{-\frac{1}{2}} \gamma^{\frac{2}{v}} (r_A^5 + 16r_A^2 r_{AM}^3 - 12r_A^3 r_{AM}^2) (kT)^{\frac{v-4}{2v}}. \quad (14)$$

Здесь $r_{AM} = r_A + r_M/2$ — расстояние между центрами атома A и частицы M в момент столкновения; r_A — соответствующее расстояние между атомами A . Заметим, что зависимость K_r от масс частиц получилась такой же, как и в сравнительно строгих статистических теориях Вигнера [1, 7], Кекка [7] (см. также динамические расчеты [12]).

Рассмотрим рекомбинацию атомарного кислорода. Пусть стабилизирующей частицей будет Ag . Силовые постоянные для взаимодействия притяжения $\text{O}-\text{O}$ и молекулярные диаметры для O и Ag можно взять из [7], рассматривая притяжение как часть потенциала Леннарда — Джонса ($r_0 = 2,7 \text{ \AA}$, $r_{\text{Ag}} = 3,42 \text{ \AA}$, $2\gamma/vk = 120 \text{ K}$). На рис. 1 представлено сравнение проведенных расчетов КСР по формуле (14) с имеющимися экспериментальными и теоретическими данными.

Учет сильного отталкивания (потенциал Сюзерленда)

Пусть рекомбинирующие частицы взаимодействуют согласно потенциалу Сюзерленда, применяемому при расчетах переносных свойств сред [5]. Тогда эффективная потенциальная энергия имеет вид

$$\varphi_{\text{эф}} = \infty, \quad r < r_{AB}, \\ \varphi_{\text{эф}} = -\frac{2\gamma}{v} \left(\frac{r_{AB}}{r} \right)^v + \frac{Eb^2}{r^2}, \quad r > r_{AB}.$$

¹ В работе [5] R_M обозначено через χ_1 .

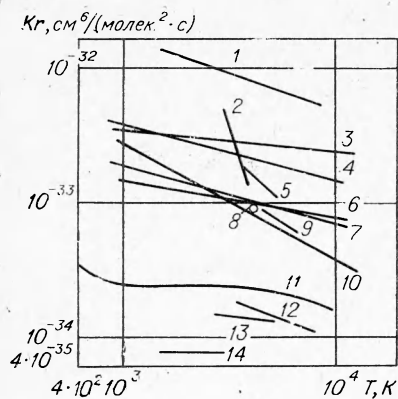


Рис. 1. Константа скорости рекомбинации (КСР) кислорода, $M = \text{Ar}$.

1 — [1]; 2 — эксперимент $M = \text{O}_2$ [2]; 3 — потенциал притяжения, (ПП), $v=3$; 4 — потенциал Сюзерленда (ПС), $v=6$; 5 — $M = \text{O}_2$ [1]; 6 — [7]; 7 — ПС, $v=3$; 8 — Камак и др. (цит. по [13]); 9 — эксперимент Эккермана (цит. по [1]); 10 — ПС, $v=6$ (с учетом мягкости отталкивания); 11 — потенциал Морзе (ПМ); 12 — эксперимент Камака, Вогана (цит. по [1]); 13 — эксперимент Байрона (цит. по [2]).

Ясно, что для $r > r_{AB}$ координата максимума барьера z и значение $b_{\max}$ останутся такими, как и ранее.

Наличие бесконечной «стенки» приводит к ограничению $z \geq r_{AB}$. Определим критическую энергию E^* , при которой $z = r_{AB}$. Тогда E^* можно найти при подстановке в z значения прицельного параметра $b = b_{\max}$

$$E^*/\gamma = v - 2/v. \quad (15)$$

Для $E > E^*$ будет иметься яма на $\Phi_{\text{эф}}$ лишь для молекул с параметром $\beta = Eb^2 \leq \beta^*$, где $\beta^* = E^* (b_{\max}^*)^2$ ($b_{\max}^*$ — прицельный параметр (13) при $E = E^*$). Тогда $b_{\max}^2 = E^* (b_{\max}^*)^2 / E$. Используя (12), (13), (15), находим сечение образования переходного состояния при $E > E^*$

$$\sigma' (E > E^*) = \frac{\pi \gamma}{E} r_{AB}^2. \quad (16)$$

Выражение (10) для КСР теперь имеет вид

$$K_r = \frac{8\pi}{\mu_{AB}^2} \left(\frac{\mu_{AB}}{2\pi kT} \right)^{3/2} \frac{(R_M e^{\Phi_{AB}/kT} - 1)}{n_M} \left\{ \int_0^{E^*} e^{-E/kT} E \sigma' (E \leq E^*) dE + \int_{E^*}^{\infty} e^{-E/kT} E \sigma' (E > E^*) dE \right\}. \quad (17)$$

Подставляя в это выражение (12), (16) с учетом (13), используя $(R_M e^{\Phi_{AB}/kT} - 1)$, как и в формуле (14), получаем КСР для случая потенциала Сюзерленда

$$K_r = \frac{(2\pi)^{3/2}}{24} \mu^{-\frac{1}{2}} k^{\frac{1}{2}} (r_A^5 + 16r_A^2 r_{AM}^3 - 12r_A^3 r_{AM}^2) \frac{\gamma}{k} \left\{ \frac{\gamma}{k} \cdot \frac{(v-2)}{T^{3/2}} \times \right. \\ \left. \times \left[\frac{1}{2(v-1)} - \frac{\gamma(v-2)}{kv(3v-2)T} + \left(\frac{\gamma}{k} \right)^2 \cdot \frac{(v-2)^2}{v^2 4(2v-1)T^2} \right] + \frac{e^{-\frac{\gamma(v-2)}{vkT}}}{T^{1/2}} \right\}. \quad (18)$$

Поскольку при расчетах КСР не принимался во внимание механизм реакции через комплекс АМ [4], то область применимости полученных формул (14), (18) ограничена снизу температурой — kT порядка энергии Ван-дер-Ваальсового притяжения рекомбинирующих частиц к частице среды М. Область применимости по плотности определяется условием эффективности трехчастичного процесса рекомбинации [4].

Рассмотрим задачу о рекомбинации атомарного кислорода в среде Аг. Данные по характеристикам потенциала Сюзерленда для атомов О можно получить из [5, 6], ($r_0 = 2,29 \text{ \AA}$, $r_{\text{Ag}} = 3,42 \text{ \AA}$, $\left(\frac{\gamma}{vk} \right)_{v=3} = 332 \text{ K}$).

Тогда по формуле (18) для различных показателей v можно подсчитать K_r . Результаты представлены на рис. 1.

Если учесть некоторое уменьшение диаметра частиц с увеличением температуры (мягкость отталкивания), приравнявая коэффициенты вязкости для потенциала Леннарда — Джонса и потенциала твердых

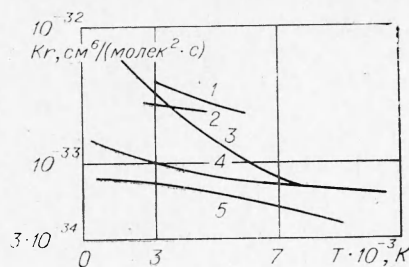


Рис. 2. КСР кислорода, $M=0$.
Эксперимент: 1 — Ринка (цит. по [14]), 2 — Байрона (цит. по [14]), 3 — Деметриадеса, Фабера и др. (цит. по [1]), 4 — ПС, $\nu=6$; 5 — ПМ.

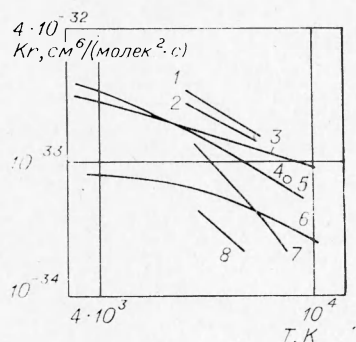


Рис. 4. КСР водорода, $X^1\Sigma_g^+$, $M=H_2$.
Эксперимент: 1 — [18], 2 — [19]; 3 — ПС, $\nu=6$; 4 — эксперимент [13]; 5 — расчет [22]; 6 — ПМ; 7 — эксперимент [20]; 8 — эксперимент [21].

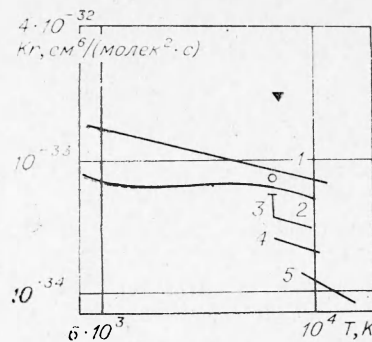


Рис. 3. КСР азота, $X^1\Sigma_g^+$, $A+\Sigma_u^+$, $M=Ag$.
1 — ПС, $\nu=6$; 2 — ПМ; эксперимент: 3 — [15], 4 — [16], 5 — [17], $\blacktriangledown$ — Камак и др., $\circ$ — Кари (цит. по [13]).

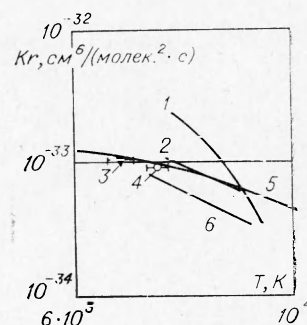


Рис. 5. КСР водорода, $M=Ag$.
1 — эксперимент [20]; 2 — эксперимент [19]; 3 — эксперимент [24]; 4 — эксперимент [25]; 5 — ПМ; 6 — эксперимент [23].

сфер для рекомбинирующих частиц и точечных сил отталкивания и твердых сфер [5] для стабилизирующей частицы, то при $\nu=6$ (наиболее реальное притяжение) получаются результаты, обозначенные на рис. 1.

Аналогичные расчеты были проведены и для задач о рекомбинации атомов O на третьем теле O, рекомбинации атомов N на Ag, атомов H на H_2 и Ag. Сравнение результатов этих расчетов с экспериментом и расчетами других авторов представлено на рис. 2—5.

Потенциальная функция Морзе

Рассмотренные ранее простые потенциалы позволили получить аналитические выражения для КСР. Однако необходимо более точно описывать реальное взаимодействие между атомами A и B. Поэтому примем, что рекомбинирующие частицы взаимодействуют между собой по потенциалу Морзе, а с частицей M — по закону твердых сфер. Тогда эффективная потенциальная энергия имеет вид

$$\Phi_{\text{эф}} = D \{ [1 - \exp(-\rho(r - r_e))]^2 - 1 \} + Eb^2/r^2,$$

где D , ρ , r_e — параметры потенциальной функции Морзе [1]. Эта функция удовлетворительно согласуется с реальными внутримолекулярными потенциалами, непосредственно полученными из эксперимента [8]. Это позволяет провести более критическую проверку введенной аппроксимации интеграла столкновений.

Расчетом на ЭВМ находятся решения z и $b_{\max}$ системы уравнений $d\varphi_{\text{эф}}/dr=0$, $\varphi_{\text{эф}}-E=0$ и «критическое» значение энергии E^* , при котором совпадают точки минимума и максимума кривой $\varphi_{\text{эф}}$. Для $E > E^*$ сечение $\sigma'(E)$ находится так же, как и в случае потенциала Сюзерленда. Потенциал Морзе с определенными параметрами описывает определенное электронное состояние молекулы. Поэтому необходимо выражение (17) для КСР, по которому проводится расчет, умножить на λ — вероятность того, что в процессе рекомбинации будет образовываться данное электронное состояние [1]. Параметры различных функций Морзе и множители λ брались из таблиц работ [7, 9].

Для задачи о рекомбинации кислорода на Ag учитывалась возможность образования четырех электронных состояний молекулы O_2 : $X^3 \Sigma_g^-$, $a^1 \Delta_g$, $b^1 \Sigma_g^+$, $A^3 \Sigma_u^+$. Принималось во внимание уменьшение диаметра частиц с увеличением температуры. Для этого вычислялось расстояние наибольшего сближения [6] атомов Ag, взаимодействующих по закону $\sim r^{-6,06}$, полученному из экспериментов по рассеянию молекулярных пучков [10]. Результаты расчетов приведены на рис. 1. Подобные расчеты были выполнены и для рекомбинации атомов O ($M=O$), атомов N ($M=Ag$), атомов H ($M=Ag$; H_2). Сравнение полученных КСР с экспериментальными данными представлено на рис. 2—5. Из рисунков видно, что результаты расчетов в среднем удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными. (Рис. 2 показывает некоторое занижение вычисленных КСР¹.) По-видимому, это является следствием пренебрежения возможностью образования связанных состояний с третьим телом $M=O$.

Согласие расчетов с экспериментальными данными для рассмотренных систем позволяет полагать, что предложенная аппроксимация рекомбинационного процесса может быть полезна и при описании других реакций рекомбинации в тройных столкновениях.

Автор глубоко признателен Р. И. Солоухину за оказанное внимание и поддержку работы и Н. М. Кузнецову за критические и плодотворные обсуждения.

Поступила в редакцию
29/IV 1975

ЛИТЕРАТУРА

1. Дж. Кларк, М. Макчесни. Динамика реальных газов. М., «Мир», 1967.
2. Р. И. Солоухин. Методы измерений и основные результаты в экспериментах на ударных трубах. VII Международный симпозиум по ударным трубам. Новосибирск, препринт 307, 1969.
3. Н. М. Кузнецов. ФГВ, 1973, 9, 5, 683.
4. В. Н. Кондратьев, Е. Е. Никитин. Кинетика и механизм газофазных реакций. М., «Наука», 1974.
5. С. Чепмен, Т. Каулинг. Математическая теория неоднородных газов. М., ИЛ, 1960.
6. Дж. Гиршфельдер, Ч. Кертисс, Р. Берд. Молекулярная теория газов и жидкостей. М., ИЛ, 1961.
7. J. C. Keesom. J. Chem. Phys., 1960, 32, 4, 1035.
8. F. R. Gilmore. J. Q. S. R. T., 1965, 5, 4, 369.
9. V. Shui, J. Appleton, J. Keesom. 13-th Symposium on Combustion, 1971, p. 21.
10. В. Б. Леонас. УФН, 1972, 107, 1, 29.
11. Е. В. Ступоченко, С. А. Лосев, А. Н. Осипов. Релаксационные процессы в ударных волнах. М., Наука, 1965.
12. A. F. Clagge, G. Burns. J. Chem. Phys., 1971, 55, 10, 4717.
13. В. Н. Кондратьев. Константы скорости газофазных реакций. М., «Наука», 1970.
14. J. Wilson. J. Fluid Mech., 1963, 15, 4, 497.
15. S. Byron. J. Chem. Phys., 1966, 44, 4, 1378.
16. B. Cary. Phys. Fluids, 1965, 8, 1, 26; 1966, 9, 5, 1047.

¹ Как третье тело, атомы O очень эффективны в диссоциации и рекомбинации [11].

17. J. Appleton, M. Steinberg, D. Liquornik. J. Chem. Phys., 1968, 48, 2, 599.
18. J. Rink. J. Chem. Phys., 1962, 36, 1, 262.
19. T. Jacobs, R. Giedt, N. Cohen. J. Chem. Phys., 1967, 47, 1, 54.
20. I. Hurle, A. Jones, J. Rosenfeld. Proc. Roy. Soc., 1969, A310, 1501, 253.
21. W. Gardiner, G. Kistiakowsky. J. Chem. Phys., 1961, 35, 5, 1955.
22. V. H. Shui, J. P. Appleton. J. Chem. Phys., 1971, 55, 7, 3126.
23. A. Myerson, W. Watt. J. Chem. Phys., 1968, 49, 1, 425.
24. G. Schott, P. Bird. J. Chem. Phys., 1964, 41, 9, 2869.
25. A. Gay, N. Pratt. Proc. of the 8 Int. Shock Tube Symp., London, Chapman and Hall, Paper no. 39, 1971.

УДК 539.371+539.379.4

УПРУГИЕ ПРЕДВЕСТНИКИ ПЛАСТИЧЕСКИХ ВОЛН, РАСПРОСТРАНЯЮЩИХСЯ В НЕСИММЕТРИЧНЫХ НАПРАВЛЕНИЯХ КРИСТАЛЛА

А. Н. Лузин

(Новосибирск)

Монокристалл во многих отношениях является более простой механической системой, чем поликристаллы и аморфные твердые тела. Вследствие этого выяснить механизмы как упругой, так и пластической деформаций, происходящих в монокристалле при ударных нагрузках, по-видимому, проще, чем в других материалах. Многие материалы, подвергаемые с исследовательской или технологической целью воздействию ударных волн, являются поликристаллами. Они, таким образом, содержат небольшие монокристаллы, произвольным образом ориентированные относительно направления распространения ударной волны. Поэтому вполне понятен интерес, проявляемый к исследованию процесса распространения ударных волн как в симметричных так и несимметричных, направлениях монокристалла (см., например, [1—3]). При исследованиях процесса распространения ударных волн была обнаружена существенная зависимость характера пластической деформации от направления распространения.

Известно, что напряженное состояние, непосредственно предшествующее пластической деформации, создается в упругом предвестнике. Для сильно анизотропных кристаллов деформация материала в упругом предвестнике может существенно отличаться от простого продольного сжатия — вследствие анизотропии возникают деформации поперечного сдвига. Таким образом, чтобы предугадать характер пластической деформации в сильно анизотропных кристаллах, необходимо исследовать напряжения и деформации, возникающие в упругом предвестнике.

Упругий предвестник надо рассматривать как результат воздействия ударной нагрузки на упругий кристалл. Следовательно, для физики ударных волн в кристаллах представляют интерес задачи о распространении упругих волн, возникающих в результате соударения кристаллов и воздействия на плоскую поверхность кристалла равномерно распределенной силы. Соударение двух частей одного произвольно ориентированного кристалла, имеющего решетку Бравэ, рассмотрено в работе [4] в гармоническом приближении динамики кристаллической решетки. Здесь же исследовано воздействие ограниченного во времени импульса постоянной силы, приложенной к произвольной плоской поверхности кристалла. Затем эти задачи были обобщены на случай сложной решетки [5] и решетки, содержащей изотопический дефект [6]. В ра-