

ЛИТЕРАТУРА

1. Шадов В. П., Мышелов Е. П., Крот А. М. Измерение катодных падений в расходной дуге. — В кн.: Материалы II Всесоюзной конф. по плазменным ускорителям. Минск, 1973.
2. Норотников А. А., Петросов В. А., Острцов И. Н. Приэлектродные процессы. — В кн.: Физика и применение плазменных ускорителей. Минск, «Наука и техника», 1974.
3. Огарков В. М., Огородников С. Н., Степанов В. Н. К расчету многостержневого катода сильноточного источника плазмы. — «Радиотехника и электроника», 1976, т. 21, № 12.
4. Гриппин С. Д., Литвак А. К., Огородников С. Н., Степанов В. Н. Исследование модели стационарного электроплазменного ускорителя средней мощности. — ЖТФ, 1977, т. 47, № 2.
5. Бабкин Г. В., Михалев В. Г., Огородников С. Н., Орлов Р. В., Потапов А. В. Экспериментальное исследование разряда в сильноточном коаксиальном источнике плазмы. — ЖТФ, 1975, т. 45, № 9.
6. Плешивцев Н. В. Катодное распыление. М., Атомиздат, 1966.
7. Delcroix J. L., Minoo H., Trindade A. R. Etablissement d'une regle generale pour une decharge d'arc à cathode creuse. — «J. de Physique», 1968, vol. 29, N 6.
8. Lorente-Arcas A., Bakhoule A. Mise en évidence d'une pression élevée dans le zone active d'une cathode creuse. — «C. R. Acad. Sci. Paris», 1970, t. 271 B, p. 180—183.
9. Lidsky L. M., Rothleder S. D., Ros D. I. et al. Highly ionized hollow cathode discharge. — «J. Appl. Phys.», 1962, vol. 33, N 8.
10. Субботин В. Н., Иванковский М. Н., Арнольдов М. Н. Физико-химические основы применения жидкометаллических теплоносителей. М., Атомиздат, 1970.
11. Бабкин Г. В., Михалев В. Г., Морозов Е. П., Потапов А. В. Экспериментальное исследование плазмы в многоканальном катоде. — ПМТФ, 1976, № 6.
12. Бабкин Г. В., Морозов Е. П., Потапов А. В., Цветкова Л. Е. Приэлектродный слой с отрицательным падением потенциала в плазме лития. — В кн.: Материалы VI Всесоюзной конф. по генераторам низкотемпературной плазмы. Фрунзе, «Илим», 1974.
13. Schissel P. O., Trulson O. C. Mass-spectrometric study of the oxidation of tungsten. — «J. Chem. Phys.», 1965, vol. 43, N 2.
14. Птушинский Ю. Г., Чуйков Б. А. Масс-спектрометрическое исследование взаимодействия кислорода с гранями (110) и (100) ионокристалла вольфрама. — ФТТ, 1968, т. 10, № 3.
15. Бабкин Г. В., Гупало М. С., Медведев В. К., Палюх Б. М., Смерека Т. П. Адсорбция смешанных лантаново-литиевых, кислородно-литиевых и кислородно-лантановых пленок на грани (100) вольфрама. — В кн.: Материалы XVI Всесоюзной конф. по эмиссионной электронике. Т. 1. Махачкала, 1976.

УДК 533.6.011.8

ВРАЩАТЕЛЬНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ МОЛЕКУЛЯРНОГО АЗОТА В СВОБОДНО РАСШИРЯЮЩЕЙСЯ СТРУЕ

*А. Н. Варгин, Н. А. Ганина, Н. В. Карелов,
В. К. Конюхов, А. И. Луковников, А. К. Ребров,
Р. Г. Шарафутдинов*

(Москва, Новосибирск)

В связи с предположением о возможности создания газодинамического лазера на вращательных переходах двухатомных молекул [1, 2] и газодинамического конденс-лазера, использующего явление конденсации для создания инверсной заселенности [3—5], представляется необходимым количественное описание кинетики вращательной релаксации простейших двухатомных молекул. В отличие от традиционного подхода в газовой динамике и теории про-

цессов переноса, когда при описании вращательной релаксации используется один параметр (время вращательной релаксации), при решении задач спектроскопии и лазерной физики требуется существенно более подробное описание на уровне заселенности отдельных вращательных состояний.

Данная работа посвящена теоретическому и экспериментальному исследованию вращательной релаксации азота в свободной струе низкой плотности в условиях, когда имеет место существенная неравновесность в заселенности вращательных уровней. На основе развитых ранее представлений [1, 6] построена модель релаксирующего газа, дающего величину заселенности отдельных вращательных уровней. Выбор свободной струи молекулярного азота как предмета для исследований объясняется тем, что газодинамика такого течения хорошо изучена [7]. Кроме того, в настоящее время развиты диагностические методы определения концентрации молекул на многих ($k \leq 20$) вращательных уровнях [8]; поэтому струя является хорошим объектом, на котором возможно провести детальное сравнение теории с экспериментом, что и сделано в данной работе. В теоретическом описании исследуемого в работе течения с релаксацией допускается разделение процессов поступательной и вращательной релаксации, основанное на том, что установление максвелловского распределения молекул по скоростям за счет упругих соударений происходит быстрее, чем перераспределение молекул по вращательным уровням за счет неупругих соударений. Для молекулярного водорода с большой величиной вращательного кванта такой подход, по-видимому, справедлив [9]. Для молекул азота, у которых вращательная постоянная примерно в 20 раз меньше, модель с разделением процессов гипотетична и проверяется в данной работе сравнением расчетов с экспериментом. При этом предполагается, что вращательная релаксация протекает в потоке молекул N_2 с известным распределением температуры, плотности и скорости, полученным из измерений.

1. Данные по заселенности вращательных уровней и распределению газодинамических параметров получены в условиях, когда кинетика заселенностей обусловлена вращательной релаксацией и можно пренебречь влиянием фона [8], конденсации [4] и эффектами замораживания поступательной температуры. Исследование выполнено в газодинамической трубе низкой плотности Института теплофизики СО АН СССР [10], оснащенной электронно-пучковой и молекулярно-пучковой диагностикой для измерений плотности, заселенности вращательных уровней [8] и функции распределения молекул по скоростям [11]. Использовались звуковые сопла диаметром от 0,5 до 5 мм, с отношением толщины кромки сопла к его диаметру меньше 0,02. Числа Рейнольдса по параметрам критического сечения были всегда больше 100, что давало основание пренебречь влиянием пограничного слоя в сопле. Температура торможения в форкамере сопла во всех экспериментах комнатная ($T_0 = 292$ К). Рабочий газ — технически чистый азот.

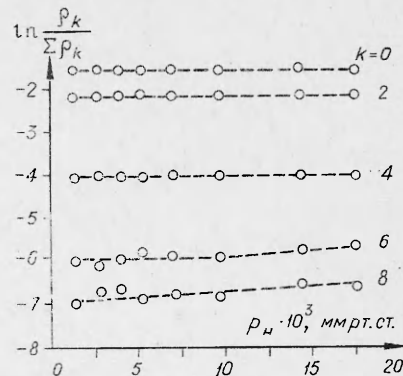
В результате взаимодействия газа, истекающего из сопла, с газом окружающего пространства образуется фон из молекул газа, проникших в ядро струи, и молекул струи, столкнувшихся с последними и потерявших скорость направленного движения [12]. Распределение заселенностей вращательных уровней молекул фона обычно соответствует температуре более высокой, чем температура в струе. В результате влияние фона оказывается наиболее заметно при измерениях заселенностей верхних уровней, которые опустошены релаксационным процессом при расширении. Как отмечено в [8], небольшое количество ($\leq 1\%$) более горячего газа, несущественное в определении заселенностей нижних уровней, значительно изменяет заселенность верхних. Учет влияния фона осуществлялся экспериментально. Для этого на максимальном расстоянии от среза сопла, т. е. там, где влияние фона наиболее существенно, производились измерения при различных давлениях в окружающем пространстве p_H . Результаты измерений для $p_0 d_* = 493$ мм рт. ст. · мм (p_0 — давление торможения, d_* — диаметр критического сечения сопла) представлены на фиг. 1, где ρ_k — заселенность k -го вращательного уровня, нормированная по плотности газа

$\sum_0^{\infty} \rho_k$; p_H — давление в окружающем пространстве, мм рт. ст. Как видно, влияние фона становится несущественным при $p_H < 5 \cdot 10^{-3}$ мм рт. ст. для уровней с $k < 8$. Заметим, что при $p_0 d_* < 493$ влияние фона сокращает размер участка струи, пригодного для сравнения с расчетом.

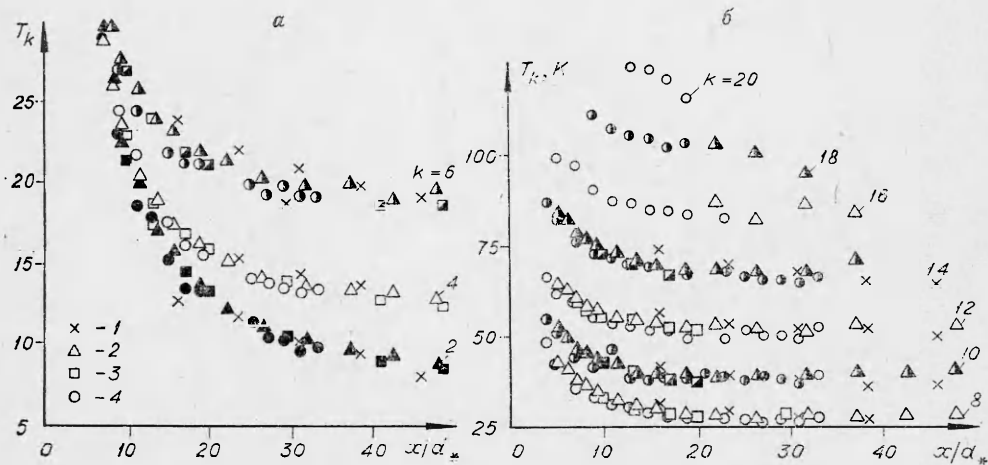
При всех давлениях торможения пересыщение достигалось на расстояниях от среза сопла x/d_* (x — расстояние от среза сопла) от 2,5 до 3,5, т. е. в потоке в области измерения возможна конденсация. Кинетика заселенностей вращательных уровней в потоке конденсирующегося газа значительно отличается от таковой, когда эффект конденсации незначителен [4, 5]. Как известно, параметром подобия для вращательной релаксации в струе однородного газа при постоянной температуре торможения является $p_0 d_*$, а конденсации $p_0 d_*^n$; по данным [13] для азота $n = 0,55$. Поэтому изменением d_* при постоянном значении $p_0 d_*$ можно проконтролировать влияние конденсации. Результат такой проверки для максимального значения $p_0 d_*$ показан на фиг. 2, а, б, где приведены температуры заселения k -го уровня

$$T_k = -B_0 k(k+1) / \ln [g_0 \rho_k / (g_k \rho_0) l,]$$

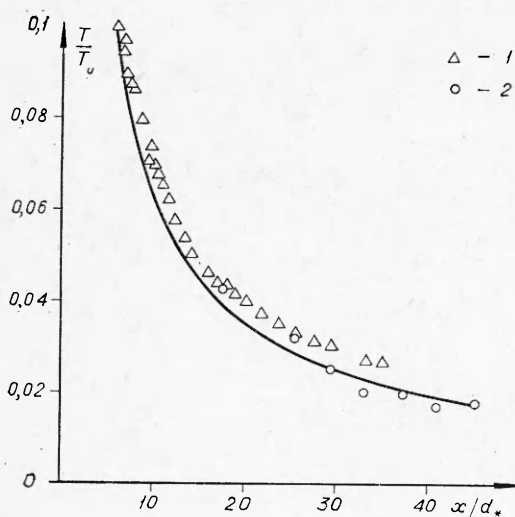
B_0 — вращательная постоянная; ρ_k , g_k — заселенность и статистический вес k -го состояния. Измерения проводились на четырех соплах $d_* = 0,54$; 2; 2,11 и 5 мм (точки 1—4 соответственно). Данные, полученные при одинаковом $p_0 d_*$ и разных диаметрах сопел, согласуются между собой, свидетельствуя о несущественном влиянии конденсации на кинетику заселенностей при данном $p_0 d_*$, но и при значениях $p_0 d_*$, меньших указанного. Следует все же отметить тенденцию к увеличению температур заселения с увеличением давления торможения, связанную, по-видимому, с эффектом конденсации.



Фиг. 1



Фиг. 2



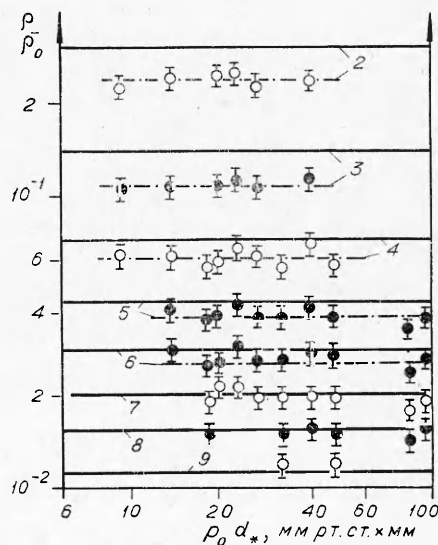
Ф и г. 3

и оценочная температура T_t в пределах погрешности измерений совпадают. При значениях x/d_* , больших указанных, данные расходятся, что вызвано нарушением максвелловского распределения по скоростям. Изэнтропическая температура при $x/d_* < 30$ лежит несколько ниже экспериментальных данных по T_t . Но для данного $p_0 d_*$ это отличие меньше 2К, и в дальнейшем им можно пренебречь.

Можно ожидать, что при низких значениях $p_0 d_*$ в результате замораживания вращательной релаксации газ будет расширяться как одноатомный с соответствующими значениями скорости, плотности и температуры. Как видно, из результатов измерений плотности ρ , нормированной на плотность торможения ρ_0 , представленных на фиг. 4 (цифрами даны значения x/d_*), этот эффект не обнаруживается при $p_0 d_* \geq 10$. Относительная плотность ρ/ρ_0 на постоянном расстоянии от среза сопла не зависит от $p_0 d_*$. Из уравнения неразрывности следует, что вращательная и поступательная релаксации в рассмотренном диапазоне $p_0 d_*$ не оказывают заметного влияния также на скорость потока.

На фиг. 4, кроме экспериментальных данных, сплошными линиями нанесены результаты изэнтропического расчета для $\gamma = 1,4$. Экспериментальные данные и теоретический расчет не совпадают. Причем это отличие возрастает при приближении к срезу сопла. Как показано в [12], расчетные и экспериментальные значения плотности совпадают, если положение звукового сечения $x/d_* = 0$ принять смещенным вверх по потоку на 0,6, а диаметр критического сечения — равным 0,943 от геометрического диа-

Нарушение максвелловского распределения, имеющее место при расширении, слабо влияет на плотность и скорость, но приводит к неопределенностям в задании поступательной температуры. Для выяснения этого вопроса при $p_0 d_* = 493$ проводились сравнения перпендикулярной температуры $T_\perp$, полученной методом молекулярного пучка [11] (фиг. 3, точки 2), поступательной температуры T_t , оцененной по температурам заселения нижних уровней [12] (точки 1), и результатов изэнтропического расчета для отношения теплоемкостей $\gamma = 1,4$ (сплошная линия). Как видно, при $x/d_* \leq 30$ перпендикулярная температура



Ф и г. 4

метра. Такая же поправка необходима для совпадения данных измерений статического давления [14] и вызвана тем, что положение и реальная форма звукового сечения отличаются от заданной в расчете. Совпадение расчетных и экспериментальных данных с указанными поправками дает право задавать плотность изэнтропической. При $x/d_* < 3,2$ данные изэнтропического расчета аппроксимировались полиномом четвертой степени, а с $x/d_* > 3,2$ использовалась аппроксимационная формула Шермана [14] для числа Маха; далее по известным изэнтропическим формулам вычислялись плотность и скорость. Совпадение экспериментальных данных и изэнтропического расчета (с указанными поправками) для $p_0 d_* = 493$ до $x/d_* \approx 30$ дает возможность использовать изэнтропические соотношения и для расчета поступательной температуры, но только для $p_0 d_* > 493$. Для значений $p_0 d_*$, меньших указанного, за поступательную температуру принята температура, полученная экстраполяцией температур заселения к нулевому значению вращательного квантового числа.

2. Будем считать, что столкновения между молекулами сопровождаются неупругими процессами

$$N_2(k_1) + N_2(k_2) \rightleftharpoons N_2(k_1 + \Delta k_1) + N_2(k_2 + \Delta k_2),$$

где в скобках записаны номера вращательных уровней основного электронного и колебательного состояния молекулы N_2 ; $\Delta k_1, \Delta k_2$ — их изменение при акте столкновения. Подобные неупругие столкновения сопровождаются обменом энергией между поступательными и вращательными степенями свободы. При этом изменяются квантовые состояния одной (rt -процессы) или обеих (rr - и rr' -процессы) сталкивающихся молекул. Заметим, что обменные rr' -процессы ($k_1 + \Delta k_1 = k_2$; $k_2 + \Delta k_2 = k_1$) не приводят к изменению состояния системы вращательных уровней, поэтому в дальнейшем не рассматриваются.

Имея в виду низкие температуры газа ($T < 200$ К) в области сравнения эксперимента и расчета, ограничимся лишь двухквантовыми rt -процессами ($k_1 = \pm 2, k_2 = 0$, либо наоборот) и двухквантовыми rr' -процессами, при которых $\Delta k_1 = \Delta k_2$.

Вероятности вращательных переходов $P_{\substack{k_1, k_1 + \Delta k_1 \\ k_2, k_2 + \Delta k_2}}$ рассчитываются в приближении экспоненциального вида сферической части потенциала взаимодействия [6, 15]

$$V = \exp(-\alpha R) \{B + B_{20}[P_2(\cos \chi_1) + P_2(\cos \chi_2)] + B_{22}P_2(\cos \chi_1)P_2(\cos \chi_2)\},$$

где R — расстояние между центрами масс сталкивающихся молекул; χ_i — угол между молекулярной осью i -й молекулы и линией, соединяющей центры масс сталкивающихся молекул; $P_2(\cos \chi_i)$ — полиномы Лежандра второй степени; α — параметр, характеризующий вид потенциала. Коэффициенты B, B_{20}, B_{22} появляются при разложении суммы потенциалов взаимодействия между отдельными атомами, входящими в молекулы, в ряд по полиномам Лежандра $P_n(\cos \chi_i)$ [15]. При таком разложении коэффициенты B_{ij} — лишь некоторые коэффициенты пропорциональности.

Рассчитанные в квазиклассическом приближении вероятности двухквантовых rt - и rr' -переходов, согласно [15],

$$(2.1) \quad P_{\substack{k_1, k_1 - \Delta k_1 \\ k_2, k_2 + \Delta k_2}}(T) = \frac{4\pi^2 \mu^2 |\Delta \Sigma|^2}{\hbar^4 \alpha^4} \left(\frac{B_{ij}}{B}\right)^2 \times \\ \times \Phi(k_1 \rightarrow k_1 - \Delta k_1, k_2 \rightarrow k_2 + \Delta k_2) \sqrt{\frac{\pi}{3}} (A_{ij}/2 \sqrt{kT})^{1/3} \times \\ \times \exp[-3(A_{ij}/2 \sqrt{kT})^{2/3}] (1 + e^{\Delta \Sigma/2kT})^2,$$

где $A_{ij} = \pi |\Delta\Sigma| / \hbar \alpha \sqrt{2\mu}$; $\Delta\Sigma = \sum_{i=1,2} k B_0 \Delta k_i (\Delta k_i + 2k_i + 1)$; k — константа Больцмана; μ — приведенная масса сталкивающихся молекул; $\Delta k_1, \Delta k_2 = 0; \pm 2$; T — температура газа; $\hbar$ — постоянная Планка;

$$\Phi(k_1 \rightarrow k_1 - 2, k_2) = \frac{9}{40} \frac{k_1(k_1 - 1)}{(2k_1 - 1)(2k_1 + 1)};$$

$$\Phi(k_1 \rightarrow k_1 - 2, k_2 \rightarrow k_2 + 2) = \frac{81}{500} 0,43 \frac{k_1(k_1 - 1)(k_2 + 1)(k_2 + 2)}{(2k_1 - 1)(2k_1 + 1)(2k_2 + 1)(2k_2 + 3)}.$$

На фиг. 5 даны для трех значений температуры 30; 70 и 150 К приведенные (к атмосферному давлению) частоты двухквантовых столкновительных вращательных rt - и rr' -переходов для молекул N_2 :

$$\tilde{Z}_k^{rt} = \nu \sum_{k_2} \eta_{k_2} P_{k_1, k_1 - 2, k_2, k_2}, \quad \tilde{Z}_k^{rr'} = \nu \sum_{k_2} (\eta_{k_2} P_{k_1, k_1 - 2, k_2, k_2 + 2} + \eta_{k_2 + 2} P_{k_1, k_1 + 2, k_2 + 2, k_2}),$$

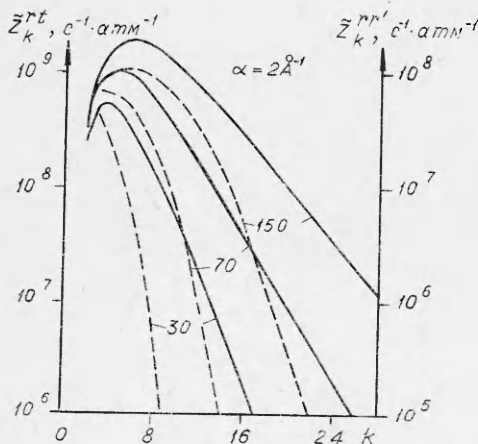
где $\tilde{Z}$ — полное число упругих столкновений одной молекулы в единицу времени при нормальном давлении; η_k — относительное число молекул в состоянии k . На фиг. 5 $\tilde{Z}_k^{rt}$ и $\tilde{Z}_k^{rr'}$ показаны сплошной и штриховой линиями соответственно. Газокинетическое сечение полагалось постоянным и равным $\sigma_g = 4\sqrt{2}\pi r^2$, где r — эффективный радиус упругого столкновения между молекулами. Значения величин, входящих в выражение (2.1), при расчете вероятностей приняты следующими:

$$B = 2 \cdot 10^{-10} (10 + \alpha^2) \text{ эрг}, \quad B_{20} = 2\alpha^2 10^{-10} \text{ эрг},$$

$$B_{22} = 0,2 \cdot 10^{-10} \alpha^4 \text{ эрг}, \quad r = 1,5 \text{ \AA}.$$

Характерные особенности представленных графиков связаны с убыванием частоты переходов при уменьшении температуры, с их уменьшением с ростом k для верхних уровней и противоположной зависимостью на нижних состояниях. Заметим также, что относительно большие вероятности обменных процессов на верхних вращательных уровнях, усредненные по относительным заселенностям уровней η_k , дают при больцмановском распределении небольшой вклад в суммарную вероятность изменения данного состояния (особенно при больших значениях α). Это обусловлено малой долей частиц η_k и резкой зависимостью вероятностей от дефекта энергии процесса.

К сожалению, реальные величины коэффициентов в анизотропной части потенциала до настоящего времени неизвестны [16]. Существует также неопределенность в выборе параметра α , который, согласно различным экспериментальным данным [17], может иметь значения в пределах от 2 до 5 $\text{\AA}^{-1}$. В связи с этим имеет смысл говорить об относительной



Ф и г 5

зависимости вероятностей переходов от k_1, k_2 . При данной температуре эта зависимость будет определяться величиной α . С другой стороны, указанные неопределенности в выборе потенциала взаимодействия можно разрешить при сравнении результатов кинетического расчета вращательной релаксации с экспериментальными данными, в результате чего получить значения величины α и поправочный множитель C для всех вероятностей:

$$\bar{P}_{\substack{k_1, k_1 + \Delta k_1 \\ k_2, k_2 + \Delta k_2}} = CP_{\substack{k_1, k_1 + \Delta k_1 \\ k_2, k_2 + \Delta k_2}}.$$

Отметим, что ограничение типов неупругих процессов четными значениями Δk_1 и Δk_2 соответствует также малости вероятности перехода молекул из одной спинмодификации в другую. При этом естественно ожидать, что системы четных и нечетных вращательных уровней должны изменяться независимым образом. Последнее предположение подтверждается результатами экспериментов как работы [8], так и результатами данной работы, где обнаружено, что отношение интенсивностей четных и нечетных линий (2 : 1) не нарушается при охлаждении в процессе расширения.

Для описания изменения заселенностей вращательных состояний используем кинетическое уравнение в виде

$$\partial \rho_k / \partial t + \operatorname{div} \rho_k \mathbf{V}_k = St_k,$$

где $\mathbf{V}_k = \mathbf{v} + \mathbf{u}_k$; $\mathbf{v}$ — скорость газового потока; $\mathbf{u}_k$ — скорость диффузионного потока (или средняя скорость движения отдельной компоненты газа относительно центра массы некоторого малого объема); St_k — интеграл столкновений или скорость изменения числа частиц в состоянии k в единице объема в результате неупругих столкновений. Для одномерного течения можно получить следующее уравнение для относительных заселенностей $\eta_k = \rho_k / \rho$:

$$(2.2) \quad \frac{d\eta_k}{dz} = \rho d/v (St_k / \rho^2) + (\rho v d_*)^{-1} \frac{d}{dz} \left(\rho D_k \frac{d\eta_k}{dz} \right),$$

где D_k — коэффициент диффузии молекул в k -м состоянии; $\bar{u}_k = -D_k \nabla \eta_k$; $z = 0,6 + 0,943x/d_*$ — приведенная координата вдоль оси течения. Из уравнения (2.2) следует, что для идеального газа при заданном поле газодинамических параметров величина $\rho_0 d_* \sim p_0 d_*$ характеризует зависимость заселенностей от координаты $\eta_k(z)$. Далее, из сравнения первого и второго слагаемых в правой части (2.2) можно заключить, что при достаточно больших $p_0 d_*$ можно пренебречь диффузионным членом. В этом случае рассматриваемое уравнение преобразуется в следующее:

$$(2.3) \quad \frac{d\eta_k}{dz} = -\frac{v d_* C}{v} \sum_{\substack{\Delta k_1 = \pm 2 \\ \Delta k_2 = 0, \pm 2}} \sum_{k_2} \left(\eta_{k_1} \eta_{k_2} P_{\substack{k_1, k_1 + \Delta k_1 \\ k_2, k_2 + \Delta k_2}} - \eta_{k_1 + \Delta k_1} \eta_{k_2 + \Delta k_2} P_{\substack{k_1 + \Delta k_1, k \\ k_2 + \Delta k_2, k_2}} \right);$$

$$(2.4) \quad \sum_k \eta_k = 1,$$

где сумма в правой части (2.3) — модельное представление интеграла столкновений St , удовлетворяющее законам сохранения числа частиц и энергии; v — полное число упругих столкновений между молекулами в единицу времени. Как показано в п. 1, значения плотности, скорости и поступательной температуры можно задавать изэнтропическими в функции

числа Маха $M(z)$. Результаты изэнтропического расчета $M(z)$ для отношения теплоемкостей $\gamma = 1,4$ аппроксимировались зависимостями

$$M(z) = 1 + \sum_{i=1}^4 C_i (z)^i \quad (0,8 \leq z \leq 2,8),$$

$$M(z) = 3,65(z - 0,4)^{0,4} - 0,822(z - 0,4)^{0,6} (z - 0,4)^{1,2} \quad (z > 2,8),$$

где $C_1 = 0,366$; $C_2 = 2,462$; $C_3 = 1,515$; $C_4 = 0,278$.

Вторая формула взята из [14]. Поступательная температура для $p_0 d_* = 493$ и 338 рассчитывалась по изэнтропическим соотношениям, а для $p_0 d_* = 144$ вносилась поправка, учитывающая отклонение измеренной температуры от изэнтропической.

Система дифференциальных уравнений (2.3) при условии (2.4) решалась численно (на ЭВМ БЭСМ-6) методом Рунге—Кутты с заданной относительной точностью $\epsilon = 10^{-3}$. Число уравнений определялось условием $3 \leq k \leq k^*$. Значение номера k в различных вариантах менялось в пределах от 30 до 40 с тем, чтобы по возможности уменьшить влияние «границы» блока уравнений на результаты расчета. Относительные заселенности нижних уровней задавались температурой распределения T_k , равной поступательной:

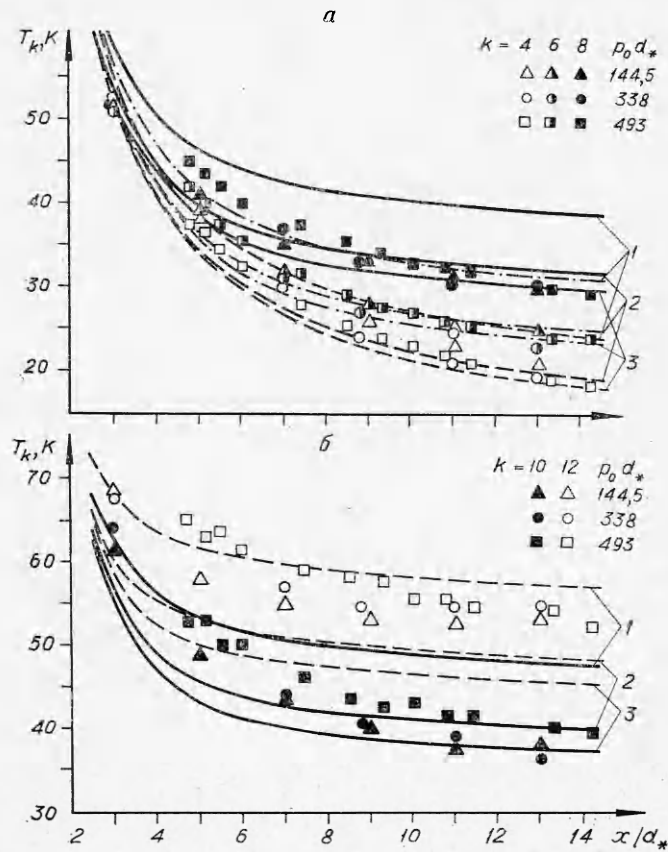
$$\eta_k = \eta_0 g_k / g_0 \exp [-B_0 k(k+1)/T_k] \quad (k = 1; 2),$$

где статистический вес $g_k = (2 + 1)g_s$; $g_s = 1/3$ для нечетных, $g_s = 2/3$ для четных значений k , заселенности уровней $k > k^*$ рассчитывались по больцмановскому закону с температурой, равной температуре заселения на верхних уровнях системы k^* и $k^* - 1$. Начальное распределение η_k^0 задавалось равновесным

$$\eta_k^0(z_0) = \eta_0 \frac{g_k}{g_0} \exp [-B_0 k(k+1)/T(z)]_{z=z_0}.$$

Величина начального значения z_0 выбиралась в пределах от 0,8 до 1,8. Причем для каждого варианта с различным значением $p_0 d_*$ проводился контроль правильности выбора z_0 по «нечувствительности» решения к уменьшению z_0 .

Результаты расчета в сравнении с экспериментальными данными представлены на фиг. 6, а, б; кривые 1—3 соответствуют расчетным данным при $p_0 d_* = 144,5$; 338 и 493. Отметим, что качественно подобные зависимости получены ранее как в расчете [1], так и в эксперименте [8]. Системы четных и нечетных уровней релаксируют независимо — температуры заселения нечетных уровней меняются так же монотонно, как и четных, и их значения находятся между соседними значениями температур заселения четных k . Расчеты и эксперименты показывают, что переход из равновесного состояния в камере торможения сопла к неравновесному на далеких расстояниях от среза сопла происходит с нарушением больцмановского распределения заселенностей вращательных уровней. Из расчетов следует, что монотонное возрастание температур заселения с увеличением k вызвано уменьшением вероятностей вращательных переходов с увеличением k (см. фиг. 5). Лучшее соответствие между расчетом и экспериментом имеет место для $p_0 d_* = 493$. Оно получено при $\alpha = 2 \text{ \AA}^{-1}$ и величине поправочного множителя $C = 10$. При изменении $p_0 d_*$ расчет показывает более быструю тенденцию к установлению равновесия на нижних уровнях ($k < 7$), чем эксперимент. На верхних уровнях тенденции эксперименталь-



Ф и г. 6

ных и теоретических результатов при изменении $p_0 d_*$ противоположны (данные экспериментов для $p_0 d_* = 493$ лежат выше, чем для меньших значений $p_0 d_*$).

3. Некоторое различие экспериментальных и теоретических результатов связано с неопределенностью вероятностей переходов на нижних вращательных уровнях, обусловленной пределами применимости квазиклассического расчета [6, 15]. Различие на верхних уровнях может быть связано как с экспериментальными погрешностями, так и с неучтенным влиянием диффузии, которое должно способствовать увеличению η_k верхних состояний, а следовательно, и увеличению их температуры заселения T_k . Различие между экспериментальными и расчетными данными становится более заметным при малых температурах $T \leq 20$ K, когда во взаимодействие может вносить вклад притягивающая часть потенциала [15] и возможно влияние на кинетику вращательных переходов процесса конденсации.

Рассмотрим более подробно влияние диффузии. Для оценки опишем приближенно поведение η_k с изменением z следующим образом:

$$\eta_k^{(0)} = \xi + \beta_k \exp(-\alpha_k z),$$

где ξ , β_k , α_k — константы, причем $\beta_k < 0 (> 0)$ для нижних (верхних) уровней системы. Полагая, что решение в нулевом приближении опреде-

ляется только столкновительными процессами

$$\frac{d\eta_k^{(0)}}{dz} = \frac{d}{\rho v} \text{St}_k(\eta_k^{(0)}),$$

получим из этого же уравнения в первом приближении выражение

$$(3.1) \quad \frac{d\eta_k^{(1)}}{dz} \approx \frac{d\eta_k^{(0)}}{dz} \left\{ 1 - \frac{1}{\sqrt{y}} \frac{0,019}{\rho r^2 d} \left(\frac{\langle v_g \rangle}{v} \right) \left[\frac{3}{2} \frac{\gamma - 1}{z + 1} + \alpha_k \right] \right\}.$$

При этом для коэффициента диффузии принято выражение $D_k = D = \langle v_g \rangle / 12\pi \sqrt{2} \rho r^2$ [18], где $\langle v_g \rangle$ — относительная скорость сталкивающихся молекул, $\langle v_g \rangle = \sqrt{4kT/\pi\mu}$; для температуры принята приближенная зависимость $T = T_0(z + 1)^{3(1-\gamma)}$. Из выражения (3.1) следует, что диффузия приводит к увеличению заселенности на верхних уровнях ($\beta_k > 0$) и к уменьшению заселенности на нижних ($\beta_k < 0$), причем с уменьшением поступательной температуры T растет влияние диффузионного члена по сравнению с интегралом столкновений, хотя отметим, что в области $z \geq 10$ калибров значения самих производных $d\eta_k/dz$ становятся малыми по абсолютной величине и заселенности в этой области меняются незначительно. Абсолютная величина поправочного члена, учитывающего влияние диффузии, как видно из выражения (3.1), уменьшается с ростом параметра моделирования релаксационного процесса $\rho_0 d_*$, т. е. становится возможным указать область значений $\rho_0 d_*$, в пределах которой для данного сечения струи можно пренебречь влиянием диффузии в расчетах кинетики вращательной системы. Так, для рассмотренных в работе режимов, согласно оценке (3.1), вклад диффузионного члена составляет величину, не превосходящую 1%.

В заключение заметим, что построенная модель вращательной релаксации в принципе эквивалентна гидродинамическому описанию с заменой решения уравнений гидродинамики полем параметров ρ , μ , T . Решение уравнений кинетики в одномерном приближении в данном случае приемлемо, так как экспериментально и теоретически показано, что отклонения от одномерности течения в наибольшей степени сказываются в области малых расстояний от среза сопла. С другой стороны, в этой области при рассматриваемых значениях $\rho_0 d_*$ распределение по вращательным уровням оказывается равновесным, численные же расчеты начинались с $z_0 > 0,5$.

Авторы отмечают, что данные молекулярно-пучковых измерений получены Р. Г. Шарафутдиновым и А. Е. Зарвиным и использованы с любезного согласия последнего.

Поступила 19 V 1978

ЛИТЕРАТУРА

1. Варгин А. Н., Ганина Н. А., Конохов В. К., Луковников А. И., Селяков В. И. Получение инверсии на вращательных уровнях двухатомных молекул при адиабатическом расширении газа. — «Квант. электроника», 1975, т. 2, № 3.
2. Решетняк С. А. Вопросы кинетики в лазерах на плазме и вращательных переходах. — В кн.: Теоретические проблемы спектроскопии и газодинамических лазеров. Т. 83. М., изд. ФИАН СССР, 1975.
3. Конохов В. К., Прохоров А. М., Тихонов В. И., Файзулаев В. Н. Конденс-лазер на парах воды. — «Квант. электроника», 1975, т. 2, № 9.
4. Карелов Н. В., Ребров А. К., Шарафутдинов Р. Г. Заселенность вращательных уровней молекул азота при неравновесной конденсации в свободно расширяющемся

- ся газе. Препринт № 20-77. Новосибирск, изд. Ин-та теплофизики СО АН СССР, 1977.
5. Карелов Н. В., Ребров А. К., Шарафутдинов Р. Г. Эффект заселения верхних вращательных уровней в процессе свободного расширения газа с кластерами.— «Письма в ЖЭТФ», 1978, т. 27, вып. 1.
 6. Варгин А. Н., Ганина Н. А., Конюхов В. К., Селяков В. И. Расчет вероятностей вращательных переходов двухатомных молекул при столкновении с тяжелыми частицами.— ПМТФ, 1975, № 2.
 7. Волчков В. В., Иванов А. В., Кисляков Н. И., Ребров А. К., Сухнев В. А., Шарафутдинов Р. Г. Струи низкой плотности за звуковым соплом при больших перепадах давления.— ПМТФ, 1973, № 2.
 8. Борзенко В. Н., Карелов Н. В., Ребров А. К., Шарафутдинов Р. Г. Экспериментальное исследование заселенности вращательных уровней молекул в свободной струе азота.— ПМТФ, 1976, № 5.
 9. Rabitz H., Lam S.-H. Rotational energy relaxation in molecular hydrogen.— «Chem. Phys.», 1975, vol. 63, N 8.
 10. Бочкарев А. А., Великанов Е. Г., Ребров А. К., Шарафутдинов Р. Г., Ярыгин В. Н. Газодинамические установки низкой плотности.— В кн.: Экспериментальные методы в динамике разреженных газов. Новосибирск, изд. Ин-та теплофизики СО АН СССР, 1974.
 11. Зарвин А. Е., Шарафутдинов Р. Г. Генератор молекулярного пучка для исследований потоков разреженного газа.— В кн.: Динамика разреженных газов. Новосибирск, изд. Ин-та теплофизики СО АН СССР, 1976.
 12. Карелов Н. В., Косов А. В., Ребров А. К., Шарафутдинов Р. Г. Исследование зоны смещения струи низкой плотности.— В кн.: Динамика разреженных газов. Новосибирск, изд. Ин-та теплофизики СО АН СССР, 1976.
 13. Golomb D., Good R. E., Bailey A. B., Basby N. N., Dawbarn R. Dimers clusters, and condensation in free jets. II.— «Chem. Phys.», 1972, vol. 57, N 9.
 14. Ashkenas H., Sherman F. S. The structure and utilization of supersonic free jets in low density wind tunnels.— In: Rarefied Gas Dynamics. 4th Internat. Sympos. Pros. Vol. 2. N. Y.—L., Acad. Press., 1966.
 15. Варгин А. Н., Ганина Н. А., Камалова Э. К., Конюхов В. К., Луковников А. И. Расчет вероятностей вращательных переходов при столкновениях между молекулами. Потенциал Морзе.— ПМТФ, 1978, № 3.
 16. Тенис Я. П. Успехи в исследовании молекулярных сил и описание явлений в потоках газа.— В кн.: Динамика разреженных газов. М., «Мир», 1976.
 17. Cubley S. I., Mason E. A. Atom-molecule and molecule-molecule potentials and transport collision integrals.— «Phys. Fluids», 1975, vol. 18, N 9.
 18. Кларк Дж., Макчесни М. Динамика реальных газов. М., «Мир», 1967.

УДК 533.932 : 533.601.18 : 539.198

О ВЛИЯНИИ АТОМНОГО ВЕСА МИШЕНИ НА ВЕЛИЧИНУ КОЭФФИЦИЕНТА АККОМОДАЦИИ ЭНЕРГИИ ИОНОВ ПОТОКА ЧАСТИЧНО ИОНИЗОВАННОГО ГАЗА

В. А. Шувалов

(Днепропетровск)

При исследовании особенностей взаимодействия молекул с поверхностью твердого тела одним из наиболее существенных параметров является коэффициент аккомодации энергии. Данные о коэффициентах аккомодации положительных ионов в диапазоне энергий $\sim 1-100$ эВ скудны [1], поэтому часто значение α_i принимается близким единице, хотя для большинства рабочих газов это условие практически не выполняется.

В данной работе приведены результаты измерения значений α_i в высокоскоростном ($u_\infty \simeq 10$ км/с) потоке разреженной плазмы.