

22. Воскобойников Ю. Е., Преображенский Н. Г., Седельников А. И. Математическая обработка эксперимента в молекулярной газодинамике.— Новосибирск: Наука, 1984.
23. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория.— М.: Физматгиз, 1963.
24. Smith N., Pritchard D. E. Simple analytical approximations based on the energy corrected sudden scaling laws // J. Chem. Phys.— 1981.— V. 74, N 7.
25. Беликов А. Е., Зарвин А. Е. и др. Электронно-пучковая диагностика азота. Многоквантовые вращательные переходы при возбуждении // ПМТФ.— 1984.— № 3.
26. Coe D., Robben F. et al. Rotational temperatures in nonequilibrium free jet expansion of nitrogen // Phys. Fluids.— 1980.— V. 23, N 4.
27. Брюховецкий А. П., Котликов Е. Н. и др. Возбуждение электронно-колебательно-вращательных уровней молекул водорода электронным ударом в неравновесной плазме дугового разряда // ЖЭТФ.— 1980.— Т. 79, № 5.
28. Лавров В. П., Островский В. Н., Устимов В. И. О механизме формирования неравновесной заселенности вращательных уровней в плазме // ЖТФ.— 1980.— Т. 50, вып. 10.
29. Schelby P., Hill R. A. Noniterative method for computing rotational temperatures from electron beam excited nitrogen fluorescence // J. Phys. Fluids.— 1971.— V. 14, N 11.

Поступила 10/II 1987 г.

УДК 533.539

СВОЙСТВА МОЛЕКУЛЯРНОГО ПЕРЕНОСА ДИССОЦИИРОВАННЫХ И ИОНИЗОВАННЫХ СМЕСЕЙ ГАЗОВ

И. А. Соколова, Г. А. Турский
(Москва)

Вопросам изучения свойств молекулярного переноса неплотных многокомпонентных частично диссоциированных и ионизованных смесей газов, в частности воздуха, уделяется немало внимания, что связано с решением многих практических задач, возникающих при исследовании высокотемпературных газодинамических процессов, протекающих в многокомпонентных смесях. Для их решения требуется обширная информация как по термодинамическим, так и переносным свойствам смесей в широких диапазонах температур и давлений. Причем, поскольку в настоящее время алгоритмы решения задач динамики газов имеют высокую точность, исходные данные по физическим свойствам (коэффициентам уравнений) не должны уступать общим требованиям точности решений самих гидродинамических уравнений.

По исходным молекулярным данным для расчета теплофизических и переносных свойств воздуха и его основных компонентов накоплен обширный материал, полученный в результате экспериментов и численных расчетов, что позволяет провести анализ возможных ошибок, допускаемых при численных расчетах свойств переноса. В отличие от экспериментальных данных по переносным свойствам, представляющих информацию в отдельных точках температур и, как правило, при одном давлении, численные расчеты самих коэффициентов переноса могут проводиться в широких диапазонах температур и давлений с точностью не хуже $\sim 1\%$. Точность численных расчетов, проводимых на основе молекулярно-кинетической теории по методу Чапмена—Энскога с использованием разложения в ряды по полиномам Сонина [1, 2], определяется числом удерживаемых членов [3—6].

Основной источник погрешностей при вычислении свойств переноса — неполнота информации по взаимодействию частиц компонентов смеси. Не существует универсальных средств получения потенциалов взаимодействия частиц во всей области межмолекулярных расстояний. Известные методы получения потенциалов как из обработки экспериментальных данных (например, по рассеянию пучков, измерениям вязкости, вириальных коэффициентов, состояний твердых тел и т. д.), так и с помощью квантово-механических расчетов дают описание только части потенциальной кривой в ограниченном диапазоне межмолекулярных расстояний R . Для получения полного потенциала необходима стыковка потенциальных функций, которая проводится с помощью сплайнов. Кроме того, остается проблема восполнения недостающих данных для ряда компонентов. Таким образом, интегралы столкновений — тройные интегралы, через которые в конечном итоге выражаются коэффициенты переноса, содержат неопределенности, связанные с методами получения потенциалов. Рассмотрение наиболее распространенных методик, используемых для расчетов интегралов столкновений атомов, ионов, молекул, позволяет провести для воздуха и азота анализ влияния существующего разброса в интегралах столкновений отдельных пар компонентов на коэффициенты вязкости и теплопроводности в различных диапазонах температур, провести сопоставление с экспериментами, установить границы возможных отклонений численных расчетов от наиболее достоверных результатов. Этот анализ и представлен в настоящей работе.

1. Точные выражения коэффициентов вязкости и теплопроводности. Методика расчета коэффициентов переноса многокомпонентных разреженных смесей газов и плазмы разработана в [1, 2, 5—7]. В основу теории явлений переноса положено кинетическое уравнение Больцмана и вытекающие из него уравнения переноса и кинетические коэффициенты. В предположении малого отклонения функции распределения компонентов от максвелловского теория явлений переноса частично ионизованных смесей [7] дает результаты, формально согласующиеся с результатами классической теории Чэпмена — Энскога (Ч — Э): коэффициенты переноса, определенные по методу Ч — Э при использовании столкновительного члена Больцмана, эквивалентны результатам разложения по полиномам Сонина, основанного на применении столкновительного члена Фоккера — Планка, если в качестве взаимодействия заряженных частиц выбран кулоновский экранированный потенциал. В пределе полностью ионизованного газа решение, найденное при разложении по полиномам Сонина и использовании кулоновского экранированного потенциала, согласуется с численным решением уравнения Фоккера — Планка [8]. Коэффициенты переноса в зависимости от числа членов ξ , удерживаемых в разложении по полиномам Сонина, имеют следующие выражения:

коэффициент вязкости во втором приближении

$$(1.1) \quad \mu(2) = -\frac{5}{2} \frac{1}{\det \|\widehat{\mathbf{q}}_{rs}\|} \begin{vmatrix} 0 & x_s \sqrt{m_s} & 0 \\ x_r \sqrt{m_r} & \widehat{\mathbf{q}}_{rs}^{0,0} & \widehat{\mathbf{q}}_{rs}^{0,1} \\ 0 & \widehat{\mathbf{q}}_{rs}^{1,0} & \widehat{\mathbf{q}}_{rs}^{1,1} \end{vmatrix},$$

$$\widehat{q}_{ij}^{m,p} = \sqrt{\frac{m_j}{2\pi kT}} \left\{ 8x_i \left(\frac{m_i}{m_j}\right)^{p+1} \sum_{k=1}^N x_k \sum_{l=1}^{m+1} [\delta_{ij} + (-1)^l \delta_{jk}] \times \right.$$

$$\left. \times \sum_{t=0}^m \frac{\left(\frac{m_j}{m_k}\right)^{2t+[1-(-1)^l]/2}}{\left(\frac{m_i}{m_k} + 1\right)^{m+p+3/2}} \sum_{s=l}^{m+p+l-2t} b_{lts}^{n,p} [\pi \overline{Q}_{ih}^{(l,s)}(T)] \right\};$$

коэффициент транспортной теплопроводности в третьем приближении

$$(1.2) \quad \lambda(3) = -\frac{75}{8} \frac{k}{\det \|\mathbf{q}_{rs}\|} \begin{vmatrix} 0 & x_s & 0 \\ x_r & \mathbf{q}_{rs}^{1,1} & \mathbf{q}_{rs}^{1,2} \\ 0 & \mathbf{q}_{rs}^{2,1} & \mathbf{q}_{rs}^{2,2} \end{vmatrix},$$

$$q_{ij}^{m,p} = \sqrt{\frac{m_j}{2\pi kT}} \left\{ 8x_i \left(\frac{m_i}{m_j}\right)^{p+1/2} \sum_{k=1}^N x_k \sum_{l=1}^{m+1} [\delta_{ij} + (-1)^l \delta_{jk}] \times \right.$$

$$\left. \times \sum_{t=0}^{m+1-l} \frac{\left(\frac{m_j}{m_k}\right)^{2t+l-1}}{\left(\frac{m_i}{m_k} + 1\right)^{m+p+1/2}} \sum_{s=l}^{m+p-(l-2)-2t} a_{lts}^{m,p} [\pi \overline{Q}_{ih}^{(l,s)}(T)] \right\}$$

$$(a_{101}^{1,1} = 25/4, a_{102}^{1,1} = -15, a_{103}^{1,1} = 12, a_{111}^{1,1} = 30/4, a_{202}^{1,1} = 4, a_{101}^{1,2} = 175/16,$$

$$a_{102}^{1,2} = -315/8, a_{103}^{1,2} = 57, a_{104}^{1,2} = -30, a_{111}^{1,2} = 420/16, a_{112}^{1,2} = -63/2,$$

$$a_{202}^{1,2} = 14, a_{203}^{1,2} = -16, a_{101}^{2,2} = 1225/64, a_{102}^{2,2} = -735/8, a_{103}^{2,2} = 399/2,$$

$$a_{104}^{2,2} = -210, a_{105}^{2,2} = 90, a_{111}^{2,2} = 5880/64, a_{112}^{2,2} = -1764/8, a_{113}^{2,2} = 162,$$

$$a_{121}^{2,2} = 1400/64, a_{202}^{2,2} = 49, a_{203}^{2,2} = -112, a_{204}^{2,2} = 80, a_{212}^{2,2} = 28, a_{303}^{2,2} = 24;$$

$$b_{101}^{0,0} = 10/3, b_{202}^{0,0} = 2, b_{101}^{0,1} = 35/3, b_{102}^{0,1} = -14, b_{202}^{1,0} = 7, b_{203}^{1,0} = -8,$$

$$b_{101}^{1,1} = 245/6, b_{102}^{1,1} = -98, b_{103}^{1,1} = 64, b_{111}^{1,1} = 140/6, b_{202}^{1,1} = 147/6, b_{204}^{1,1} = -40).$$

Здесь N — полное число компонентов в смеси; x_i, m_i — молярная кон-

центрация и масса i -й частицы; k — постоянная Больцмана; T — температура смеси; $Q_{ik}^{(l,s)}(T)$ — интегралы столкновений. Полный («эффективный») коэффициент теплопроводности λ_{eff} для химически и ионизационно равновесных течений, величина которого измеряется в экспериментах, представляет сумму: $\lambda_{\text{eff}} = \lambda + \lambda_{\text{int}} + \lambda_R$, где λ_{int} — коэффициент теплопроводности за счет передачи энергии возбужденных колебательных вращательных и электронных степеней свободы частиц [9]; λ_R — вклад в перенос энергии за счет равновесно протекающих химических реакций диссоциации и ионизации [10]:

$$\lambda_R = -\frac{1}{kT^2} \frac{1}{\det \|b_{ik}\|} \begin{vmatrix} 0 & Q_{L+1}^T & \dots & Q_N^T \\ Q_{L+1}^T & b_{L+1,L+1} & \dots & b_{L+1,N} \\ \vdots & \dots & \dots & \dots \\ Q_N^T & b_{N,L+1} & \dots & b_{N,N} \end{vmatrix};$$

L — число химических элементов в смеси; $N - L$ — число независимых реакций; Q_i^T — величины, связанные с теплотами реакций; b_{ij} — коэффициенты, зависящие от диффузионных свойств компонентов.

Сходимость разложений по полиномам Сонина при вычислении коэффициентов переноса ионизованных газов исследовалась многими авторами [3, 7]. Для воздуха сходимость всех переносных коэффициентов и эффективных коэффициентов, входящих в уравнения переноса, подробно изучалась в [6, 10], где численными расчетами всех коэффициентов установлено, что для обеспечения точности 1% необходимо вычислять $\lambda(\xi)$ при $\xi = 3$ и коэффициент вязкости $\mu(\xi)$ при $\xi = 2$ (уменьшение числа ξ на единицу приводит к ошибке вычисления $\lambda(\xi)$ до 60% и $\mu(\xi)$ до 14% в области ионизации). Для неионизованного воздуха число приближений для расчетов $\lambda(\xi)$ и $\mu(\xi)$ может быть снижено: первые ненулевые приближения $\lambda(2)$ и $\mu(1)$ обеспечивают точность вычислений не хуже 1%.

Экспериментальные исследования свойств переноса высокотемпературных газов (там, где начинаются процессы диссоциации и ионизации молекул и атомов) проводились в [11–13] для воздуха, в [14–19] для азота. Обзор и анализ возможных погрешностей экспериментальных результатов и методик измерения вязкости при высоких температурах азота и воздуха приводится в [11]. Максимальная погрешность экспериментальных данных оценивается авторами [12] в 50% при измерении λ_{eff} в интервале температур 6000–14 000 К.

2. Интегралы столкновений основных компонентов воздуха. Исходная база расчета коэффициентов переноса по методу Ч — Э (1.1), (1.2) — компонентный состав x_i смеси и интегралы столкновений $Q_{ij}^{(l,s)}(T)$, которые определяются расчетным путем по сечениям рассеяния $Q_{ij}^{(l)}$ или по потенциалам парных взаимодействий $V_{ij}(R)$:

$$Q_{ij}^{(l,s)} = \frac{4(l+1)}{(s+1)! [2l+1 - (-1)^l]} \int_0^\infty e^{-\gamma^2} \gamma^{2s+3} Q_{ij}^{(l)}(g) d\gamma, \quad \bar{Q}^{(l,s)} = \frac{Q^{(l,s)}}{\pi},$$

$$\text{где } Q_{ij}^{(l)} = 2\pi \int_0^\infty [1 - \cos^l \chi(b, g)] b db; \quad \chi_{ij}(b, g) = \pi - 2b \int_{R_m}^\infty \frac{dR/R^2}{\left[1 - \frac{b^2}{R^2} - \frac{2V(R)}{m_{ij}g^2}\right]^{1/2}};$$

b — прицельный параметр; g — относительная скорость сталкивающихся частиц на бесконечности; m_{ij} — приведенная масса частиц; $\gamma^2 = m_{ij}g^2/2kT$; R_m — расстояние наименьшего сближения.

Одним из направлений изучения потенциалов взаимодействия нейтральных компонентов смесей является восстановление потенциальных функций по данным измерений различных физических свойств в жидкой, твердой и газообразных фазах, включая традиционно используемые данные по вязкости, теплопроводности, вириальным коэффициентам, диффу-

зии и т. п. Для определения дальнедействующей части потенциала используются данные спектроскопических измерений линий в микроволновых спектрах поглощения и рассеяния, измерения сечений вращательной релаксации, дисперсии и поглощения звука, частот ангармонических колебаний (в основном для получения потенциала в области минимума потенциальной ямы), данные измерений состояний твердых тел, параметров кристаллической решетки, энергии сцепления, фононных частот и т. п. (например, определение потенциала взаимодействия $N_2 - N_2$ [20]), данные рассеяния тепловых [21] и быстрых пучков [22] (один из основных методов, используемых для восстановления потенциала взаимодействия в области отталкивательных сил) и др.

Другое направление в исследовании потенциалов взаимодействия частиц — прямой квантово-механический расчет. Наибольшее развитие квантово-механические методы получили для изучения дальнедействующих, ван-дер-ваальсовских сил, для расчета которых применяются методы теории возмущения первого и второго порядков. Используя мультипольное разложение, энергию взаимодействия представляют в виде ряда по обратным степеням R^{-n} , где первый член ряда отвечает различным значениям n в зависимости от состояния частиц. Для расчетов валентных сил применяются методы самосогласованного поля, конфигурационного взаимодействия, статистические методы, основанные на использовании функционала Томаса — Ферми — Дирака и Томаса — Ферми, и развитая в дальнейшем модель электронного газа Гордона — Кима. В принципе квантово-механические методы разработаны для учета обменных и корреляционных сил, и взаимодействие частиц может быть рассчитано в широком диапазоне действия межмолекулярных сил для различных электронных конфигураций, различной взаимной ориентации [23, 24].

Практически для расчетов свойств переноса целесообразно иметь сферически-симметричный потенциал с небольшим числом варьируемых параметров, подбираемых из условия наилучшего совпадения с результатами обработки ряда разнородных экспериментальных свойств. Простые модельные потенциалы типа модели Леннарда — Джонса, обратностепенной зависимости и т. п. для этих целей пригодны не всегда, поскольку те или иные свойства оказываются чувствительными к проявлению различных областей межмолекулярных сил — потенциал Букенгема, восстановленный по коэффициенту вязкости, не дает адекватного описания результатов рассеяния тепловых пучков [21], и наоборот; квадрупольные члены в потенциале взаимодействия мало влияют на второй вириальный коэффициент азота [24], но для согласования со свойствами кристаллической решетки (параметров решетки, энергии сцепления, фононных частот и т. п.) α - и γ -фаз кристалла N_2 во взаимодействии молекул азота учитываются члены до R^{-10} и R^{-11} [25].

Согласованные по ряду разнородных свойств (в числе которых опытные данные по вязкости, по вторым вириальным коэффициентам, самодиффузии, термодиффузии, нулевого дроссель-эффекта и др.) потенциалы взаимодействия молекул $N_2 - N_2$, $O_2 - O_2$, $N_2 - O_2$ получены в [26]. Стыковка дальнедействующей части потенциала с отталкивательной ветвью, полученной из экспериментов по рассеянию [22], проводится с помощью кубического сплайна. Для взаимодействия нейтральных атомов N, O, находящихся в основных состояниях, и их ионов N^+ , O^+ потенциалы взаимодействия рассчитаны прямыми квантово-механическими методами самосогласованного поля (СП) в [27], в приближении газoeлектронной модели (ГЭМ) — в [28]. В [26] приводится обзор квантово-механических методов расчета потенциалов взаимодействия атомов N, O.

Помимо строгих квантово-механических расчетов, для определения потенциалов взаимодействия нейтралов и их ионов известны различного рода полуэмпирические теории и правила — расчеты с использованием прямых данных спектроскопического анализа, метод Ридберга — Клейна — Риса, модели атом-атомных потенциалов (ААП), модель перекрывающихся эллипсоидов и т. д. В модели ААП, получившей хорошее под-

тверждение рядом прямых квантово-механических расчетов и сопоставлением с экспериментами для некоторых систем, потенциал взаимодействия двух молекулярных систем $V(R)$ выражается через потенциалы атом-атом $V_{ij}(r_{ij})$ в виде $V(R) = \sum_{ij} V_{ij}(r_{ij})$, где r_{ij} — расстояния между атомами, принадлежащими разным молекулам i и j . Осредненный по ориентациям потенциал $\langle V(R) \rangle$ сферически-симметричный; для экспоненциальных моделей $V_{ij}(r_{ij}) = A_{ij} \exp(-\alpha_{ij} r_{ij})$, в частности, получаем

$$\langle V(R) \rangle = \sum_i \sum_j A_{ij} \frac{\exp(-\alpha_{ij} R)}{\alpha_{ij}^3 h a_i a_j} [(\alpha_{ij} \bar{R} + 2) \operatorname{sh}(\alpha_{ij} a_i) \operatorname{sh}(\alpha_{ij} a_j) - (\alpha_{ij} a_i) \operatorname{ch}(\alpha_{ij} a_i) \operatorname{sh}(\alpha_{ij} a_j) - (\alpha_{ij} a_j) \operatorname{ch}(\alpha_{ij} a_j) \operatorname{sh}(\alpha_{ij} a_i)]$$

(a_i — расстояние от атома до центра в молекуле i). Несмотря на широкое применение модели ААП, принцип аддитивности, положенный в ее основу, приближенный, поскольку электронная плотность молекул не является простой суперпозицией электронных плотностей атомов, ее составляющих. Вследствие этого атом-атомные потенциалы модели не совпадают с потенциалами взаимодействия изолированных атомов, и для их определения требуются дополнительные исследования. Для нелинейных и длинных линейных молекул модель аддитивных сил дает лучшее согласие с экспериментами, если в нее дополнительно включен варьируемый параметр d — расстояние до силовых центров, смещенных в молекуле по отношению к равновесным положениям атомов из-за неоднородного распределения электронных плотностей. В аддитивном приближении ААП сферически-симметричные потенциалы взаимодействия атомов с нейтральными молекулами N_2 , O_2 получены в [29].

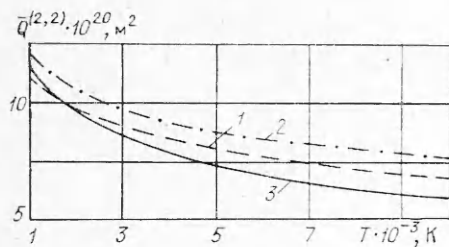
Особый тип взаимодействия частиц представляют пары нейтрал — одноименный ион. В отличие от обычного упругого рассеяния атомов, молекул, ионов процесс столкновений нейтрала с одноименным ионом сопровождается резонансной перезарядкой, которая с классической точки зрения трактуется как передача заряда ионом атому без энергообмена. При описании рассеяния это проявляется в том, что частица, отклоняющаяся на угол χ силовым центром при обычном столкновении, меняется местами с партнером по столкновениям при обмене зарядом и отклоняется на угол $\pi - \chi$. Такой процесс приводит к резкому возрастанию сечения рассеяния $Q^{(l)}$: для нечетных значений l $Q^{(l)} = 2Q_{\text{ex}}$ (Q_{ex} — сечение резонансного обмена [30]). В приближении теории возмущения стационарных состояний сечение резонансного обмена может быть выражено через вероятность резонансного обмена P_{ex} , которая при медленных столкновениях определяется по величине расщепления уровней энергии $\Delta E_{g,u} = E_g^+ - E_u^-$ терма квазимолекулы, образованной сталкивающимися частицами:

$$P_{\text{ex}} = \sin^2 \eta(b), \quad \eta(b) = \frac{1}{\hbar v} \int_{b_c}^{\infty} R \frac{[E_g^+(R) - E_u^-(R)] dR}{(R^2 - b^2)^{1/2}},$$

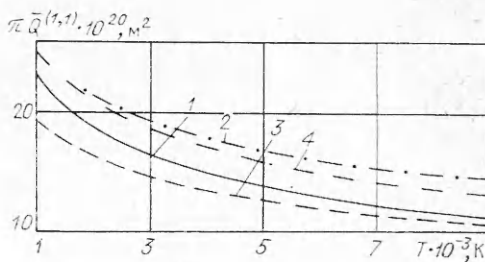
где b — прицельный параметр; v — скорость сталкивающихся частиц. В предположении экспоненциального характера зависимости энергии расщепления $\Delta E = A \exp(-\alpha R)$ для сечения обмена получено аналитическое выражение $Q_{\text{ex}} = \pi b_c^2 / 2$. Здесь b_c находится из уравнения $(\pi A / \hbar v) (\pi b_c / 2\alpha)^{1/2} \exp(-\alpha b_c) = 1$. Полученное сечение обмена хорошо аппроксимируется полулогарифмической зависимостью $Q_{\text{ex}}^{1/2} \cong C_1 - C_2 \ln v$.

Обзор сечений обмена ионов с атомами компонентов воздуха $N - N^+$, $O - O^+$, полученных квантово-механическими методами расчета энергий расщепления, полуэмпирическими методами расчета и в экспериментах по рассеянию догоняющих пучков, приводится в [26].

3. Влияние существующего разброса в интегралах столкновений основных компонентов воздуха на коэффициенты вязкости и теплопровод-

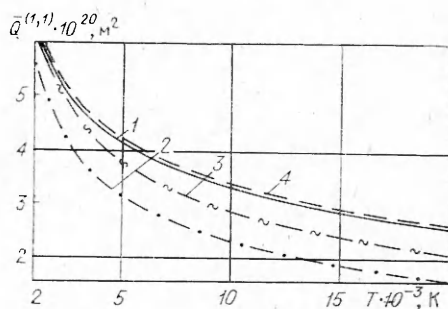


Р и с. 1



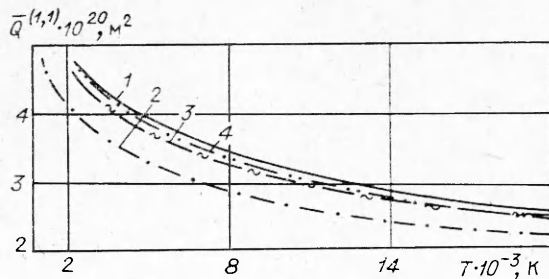
Р и с. 2

ности. Частично диссоциированный и ионизованный воздух представляет сложную многокомпонентную смесь, содержащую атомы, молекулы, молекулярные ионы, ионы атомов. Интегралы столкновений различных пар компонентов воздуха N_2 , O_2 , N , O рассчитывались в [4, 27, 31, 32] и др. При низких температурах (до начала диссоциации воздуха) основную роль в процессе переноса играют столкновения нейтральных компонентов N_2 и O_2 . В этой области температур интегралы столкновений, рассчитанные по потенциалу, полученному на основе согласованной обработки ряда разнородных экспериментальных данных и используемые для расчетов свойств переноса, обеспечивают совпадение с экспериментальными результатами по вязкости и теплопроводности (воздуха и азота) до $\sim 1-2\%$. С ростом температур и развитием диссоциации роль молекулярных компонентов в процессах переноса падает, в то время как возрастает роль столкновений атомов между собой и атомов с молекулами. Интегралы столкновений пар $N_2 - N_2$, $N - N_2$, $N - N$ и $O - O$ представлены на рис. 1—4. На рис. 1 для $N_2 - N_2$ приводится сравнение расчета $\bar{Q}^{(2,2)}$ по потенциалу [26] (кривая 1) с результатами расчетов по потенциалам отталкивательных сил, полученным из квантово-механических расчетов [23] и в приближении ААП [29] (кривые 2, 3). На рис. 2 представлены интегралы столкновений $N - N_2$, рассчитанные по потенциалам ААП из [29] (кривые 1, 2 — в [2] для получения потенциала ААП использованы атомные потенциалы изолированных атомов из [28]) и найденным из экспериментов по рассеянию [22], и полуэмпирического анализа [33] (кривые 3, 4). На рис. 3, 4 представлены интегралы столкновений $N - N$ и $O - O$, рассчитанные по потенциалам, полученным в приближении газозлектронной модели (ГЭМ) [28], потенциалам Кабли [32] (кривые 1, 2), по данным [33, 34] (кривая 3) и осредненные по электронным состояниям квазимолекул, сходящихся к наименьшему диссоционному пределу, по данным [27, 35] (кривая 4). Отклонения в интегралах столкновений $N_2 - N_2$ за счет различных представлений отталкивательной ветви потенциала от расчетов по составному потенциалу со сплайном [26] $\sim 10\%$. Отклонения в интегралах столкновений атом — атом, рассчитанных по потенциалам [33] и [34], от расчетов по ГЭМ [28] составляют для атомов $O - O$ до 15%, для $N - N$ до 40%. Однако разброс в интегралах столкновений атом — атом, рассчитанных по потенциалам из наиболее строгих квантово-механических представлений методом ССП и статистическими методами ГЭМ, не более 1—3%. В интегралах столкновений атом — молекула расхождение расчетов по существующим потенциалам для ряда компонентов воздуха может достигать $\sim 40\%$ [29], но, так же как и для компонентов атом — атом, анализом наиболее достоверных данных можно установить реальные границы разброса в интегралах столкновений, которые, естественно, уже границ



Р и с. 3

*



Р и с. 4

ментов по рассеянию пучков [41], приводятся на рис. 5 (кривые 1—6 соответственно). Видно, что максимальный разброс в интегралах столкновений достигает 2 раз, однако расхождение в интегралах столкновений, рассчитанных по [37—39], не превышает $\sim 10\%$.

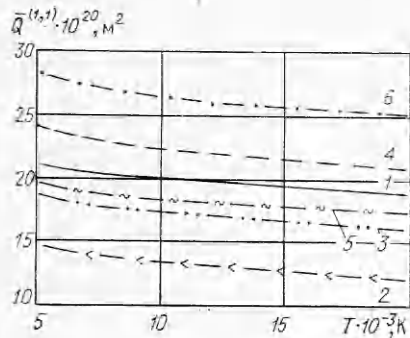
Хотя в настоящее время имеются расчеты интегралов столкновений компонентов воздуха, проведенные по достаточно надежным потенциальным функциям взаимодействия атомов и молекул [26], проанализируем влияние существующего разброса данных по интегралам столкновений различных компонентов на изменения в коэффициентах вязкости и теплопроводности химически равновесных азота и воздуха в различных диапазонах температур. В химически равновесных смесях при низких температурах (до начала диссоциации) основную роль в процессе переноса играют столкновения нейтральных молекул N_2 , O_2 . Здесь интегралы столкновений, рассчитанные по потенциалу, найденному на основе согласованной обработки ряда экспериментальных данных, обеспечивают совпадение с экспериментами по вязкости и теплопроводности воздуха и азота до 1—2%. С ростом температур и развитием диссоциации роль молекулярных столкновений в процессе переноса падает, в то время как возрастает роль столкновений атомов между собой и атомов с молекулами. Различие в интегралах столкновений молекула — молекула из-за выбора отталкивательной ветви потенциала при расчете свойств переноса при низких температурах и вплоть до 2500 К не проявляется. В области более высоких температур различие в интегралах столкновений молекула — молекула, обусловленное отталкивательной ветвью потенциала, нивелируется присутствием в смеси других компонентов. В табл. 1 приводятся расчеты λ_{eff} и μ ($p = 1,013 \cdot 10^5$ Па) воздуха по интегралам столкновений молекула — молекула [26] (отталкивательная ветвь потенциала взята из экспериментов по рассеянию [22]) и интегралам столкновений [29] (отталкивательная ветвь потенциала рассчитана по модели ААП). Расхождение в λ_{eff} меньше $\sim 1\%$, за исключением области первого пика диссоциации ($T \sim 4000$), где оно составляет $\sim 5\%$; максимальное расхождение в коэффициенте вязкости воздуха еще меньше ($\sim 3\%$).

Для сравнения в табл. 2 приводятся расчеты коэффициентов вязкости воздуха ($p = 1,013 \cdot 10^5$ Па) по потенциалам Леннарда — Джонса [2] и Кабли [32] (наиболее часто используемые в газодинамических расчетах), по потенциалам [22] и [29], а также результаты экспериментальных измерений коэффициента вязкости [42], имеющие точность $\sim 0,1\%$, и расчеты по интегралам столкновений, рекомендованным в [26] (в скобках указано отклонение в процентах от экспериментальных данных). В области температур до 2500 К расчеты по потенциалам [32] приводят к ошибке в коэффициенте вязкости (и теплопроводности λ_{eff}) до 10% , по потенциалам Леннарда — Джонса до 5% (с ростом температуры погрешность в коэффициентах переноса, вычисляемых по интегралам столкновений, для которых используется потенциал Леннарда — Джонса, возрастает до десятков процентов), что указывает на несовершенство аппроксимаций [32] и модели Леннарда — Джонса [2].

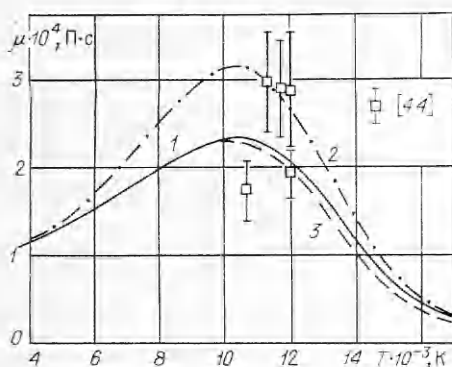
Влияние разброса в интегралах столкновений атом — молекула (которое достигает для отдельных компонентов воздуха $\sim 20\%$ (см. рис. (2)

общего разброса — в случае атом — молекула эти границы сдвигаются до $\sim 15\%$.

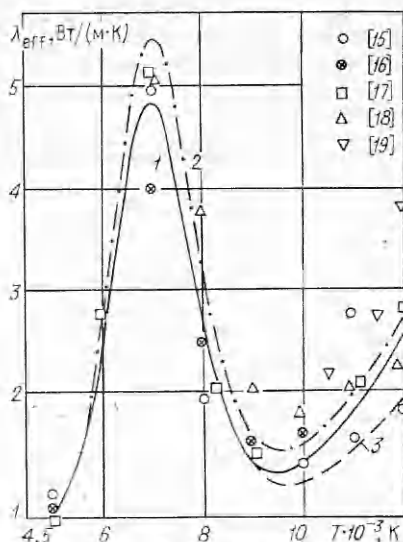
Интегралы столкновений $\bar{Q}^{1,1} N-N^+$, рассчитанные по сечениям Q_{ex} , полученным квантово-механическими расчетами методом ССП [36—38], в приближении асимптотической теории [39], теории Гайтлера — Лондона [40] и из экспери-



Р и с. 5



Р и с. 7



Р и с. 6

на коэффициенты λ_{eff} и μ представлено в табл. 3. Различие в интегралах столкновений атом — молекула, рассчитанных по потенциалам [29] и восстановленным из экспериментов по рассеянию быстрых пучков [22]

(потенциалы восстанавливались по рассеянию молекулярных пар, в которые входили исследуемые атомы), приводит в области температур 3000—7000 К к расхождению в λ_{eff} до +7, +15% и в μ до +5, +10%. Это связано, по-видимому, с занижением значений интегралов столкновений, экстраполированных в область низких температур (ниже ~ 7000 —5000 К) с помощью потенциалов, найденных из экспериментов по рассеянию быстрых пучков. С другой стороны, применение потенциалов, полученных по модели ААП [29] и ААП с потенциалами изолированных атомов, приводит к расхождению в λ_{eff} до -10, -15% и в μ до -3, -5%. Тем не менее использование ААП [29], по-видимому, обеспечивает точность расчетов λ_{eff} не хуже $\pm 5\%$, как это становится очевидным в дальнейшем при сравнении с экспериментами. При температурах выше $\sim 10\,000$ К различие в интегралах столкновений атом — молекула на коэффициенты вязкости и теплопроводности не влияет — здесь заметную роль в процессах переноса начинают играть столкновения заряженных частиц.

Т а б л и ц а 1

T, К	$\lambda_{\text{eff}}, \text{Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$			$\mu \cdot 10^4, \text{Па}\cdot\text{с}$	
	По [26]	По [29]	Изолированная ААП [29]	По [26]	По [29]
2000	9,135	0,138		0,687	6,94
3000	0,470	0,475		0,913	9,48
4000	0,564	0,593	0,543	1,180	1,23
5000	0,699	0,706	0,705	1,42	1,48
6000	2,36	2,36	2,36	1,67	1,72
7000	4,17	4,17	4,17	1,93	1,96
8000	2,28	2,28	2,28	2,11	2,11

Таблица 2

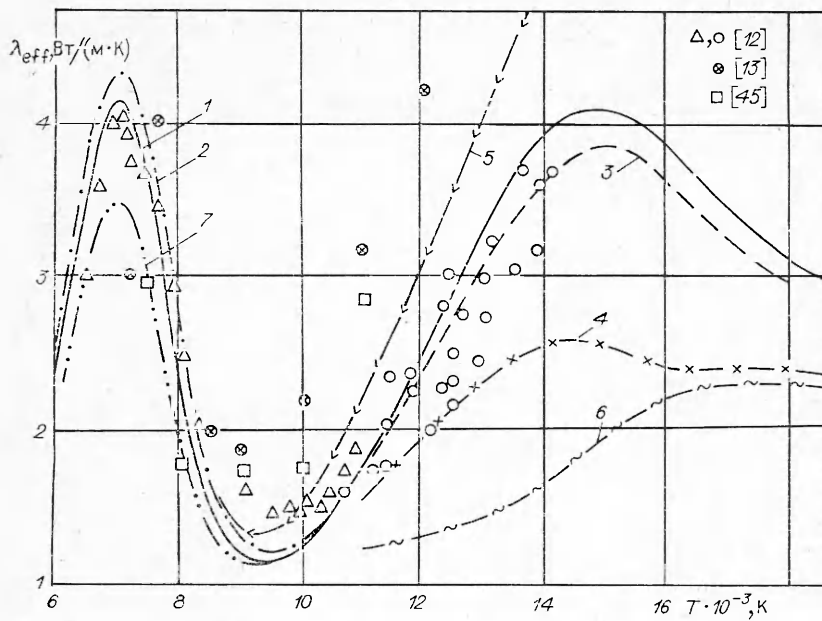
T, K	μ , мкПа·с					
	Эксперимент [42]	Расчет по данным				
		[26]	[29] %	[2] %	[32] %	[22] %
300	18,56	18,72	18,14(-2)	18,35(-1)	18,43(-0,7)	15,61(-15)
500	27,295	26,94	25,80(-5)	26,14(-4)	26,71(-1,8)	23,27(-14)
1000	43,08	42,97	42,10(-2)	41,27(-4)	44,19(-2,5)	39,99(-7)
1200	48,46	48,52	48,0(-0,9)	46,47(-4)	50,45(-4)	46,11(-5)
1400	53,64	53,81	53,7(0,1)	51,38(-4)	56,42(-4)	52,03(-5)
1500	56,18	56,35	56,5(0,4)	53,74(-4)	62,17(10)	54,92(-2)
2000	68,26	68,59	69,4(1,6)	64,97(-5)	73,11(7)	68,95(1)
2400	77,05	77,93	79,5(3)	73,62(-4)	83,51(8,4)	79,90(3,7)
2500	79,12	80,21	81,94(3,5)	75,80(-4)	86,06(8,8)	82,64(4)

Различие в интегралах столкновений атом — атом (см. рис. 3, 4) при температурах ниже 4500 К, так же как и при температурах выше $\sim 13\ 000$ К, на значения коэффициентов вязкости и теплопроводности не влияет, но в промежуточной области развитой диссоциации и начальной стадии ионизации приводит к расхождению в λ_{eff} до 8—10% и в μ до 30%. Влияние разброса в интегралах столкновений атом — атом на коэффициенты теплопроводности и вязкости азота показано на рис. 6, 7 и теплопроводности воздуха — на рис. 8. Кривая 1 — расчет по потенциалам, полученным в приближении ГЭМ [28], 2 — по потенциалам [32], при одних и тех же интегралах столкновений остальных компонентов [29].

Интегралы столкновений заряженных частиц, взаимодействие которых связано с резонансной передачей заряда, в несколько раз превышают интегралы столкновений компонентов при обычном упругом взаимодействии, поэтому уже при температурах ~ 9000 — $10\ 000$ К при незначительном процентном содержании заряженных частиц в смеси необходим учет процессов резонансного обмена. Влияние сечений резонансного обмена на точность вычислений коэффициентов теплопроводности и вязкости показано на рис. 6—9 при $p = 1,013 \cdot 10^5$ Па. На рис. 6 кривая 1 — расчет с использованием сечений обмена Капителли [36], 3 — расчет по сечениям обмена Смирнова [39]. Различие в λ_{eff} , связанное с использованием разных сечений обмена, проявляется еще в большей степени с ростом температур. На рис. 8 и 9 приводятся расчеты λ_{eff} воздуха и азота соответственно в области температур до 20 000 К, здесь 1 — расчет по сечениям обмена [37] для пары N — N⁺ и Бибе [43] для O — O⁺, 3 — по сечениям обмена [39], 5 — по сечениям обмена [36]. Максимальный разброс в коэффициентах переноса воздуха за счет использования сечений обмена, найденных различными методами исследования, до 40—50% в коэффициенте теплопроводности и до нескольких процентов в коэффициенте вязкости. Однако расхождение в λ_{eff} при применении наиболее

Таблица 3

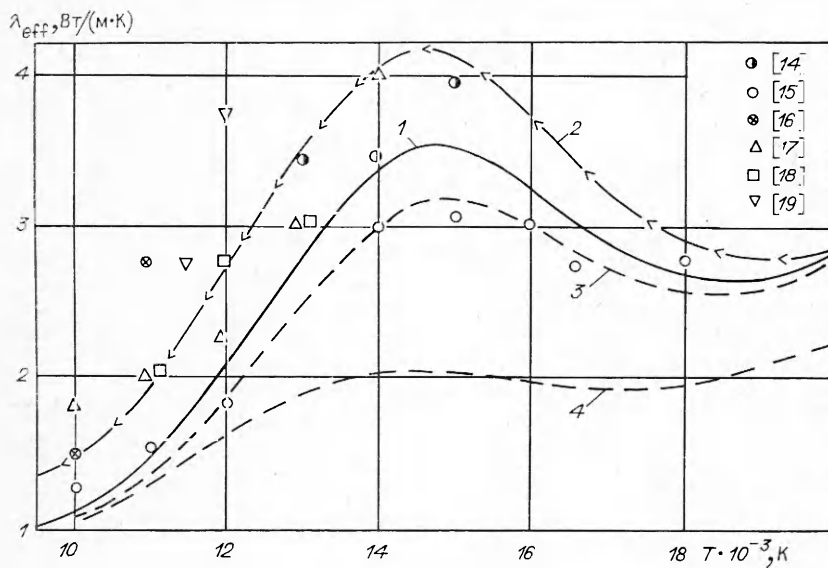
T, K	λ_{eff} , Вт/(м·К)				$\mu \cdot 10^4$, Па·с			
	По [29]	По [22]	Изолированная ААП	Δ , %	По [29]	По [22]	Изолированная ААП	Δ , %
3 000	0,470	0,543	0,451	+15÷-5	0,913	0,913	0,908	+2÷-1
4 000	0,564	0,632	0,565	+10÷+1	1,18	1,29	1,16	+9÷-1
5 000	0,699	0,749	0,633	+7÷-10	1,42	1,57	1,38	+10÷-3
6 000	2,36	2,50	2,02	+6÷-10	1,67	1,83	1,59	+9÷-5
7 000	4,17	4,44	3,48	+7÷-16	1,93	2,04	1,83	+5÷-5
8 000	2,28	2,42	1,93	+6÷-15	2,11	2,14	2,06	+1÷-1
9 000	1,21	1,24	1,12	+1÷-8	2,28	2,29	2,26	≤ 1
10 000	1,37	1,38	1,35	≤ 1	2,41	2,41	2,41	< 1



Р и с. 8

обоснованных данных по сечениям обмена [37] и [39] невелико (в пределах нескольких процентов).

Для сравнения на рис. 6—9 приводятся результаты экспериментов по коэффициенту теплопроводности воздуха [12, 13, 45], азота [14—19] и вязкости азота [44]. Сравнение расчетов коэффициентов вязкости и теплопроводности при существующем разбросе в интегралах столкновений частиц с экспериментальными результатами в принципе могло бы служить подтверждением правильности выбора тех или иных исходных данных, принятых при расчете переносных свойств. Хорошим подтверждением выбора интегралов столкновений атом — атом могли бы служить экспериментальные данные по вязкости, однако разброс экспериментальных точек μ (см. рис. 7) оказывается такого же порядка, что и разброс в μ за счет использования различных данных интегралов столкновений атом — атом. Из рис. 8 видно, что лучшее совпадение с максимальным



Р и с. 9

значением $\lambda_{\text{eff}}^{\text{max}}$ ($\sim 4,02$), полученным в экспериментах [12, 13], наблюдается при расчетах коэффициента теплопроводности, если для взаимодействий атом — атом применять потенциалы квантово-механических расчетов [28] (кривая 1). Из сопоставления λ_{eff} азота с экспериментальными данными (см. рис. 6) также видно, что для взаимодействия атом — атом предпочтение можно отдать потенциалам [28], по сравнению с [32]: в интервале температур 6000—10 000 К большинство экспериментальных точек λ_{eff} азота лежит ниже кривой, рассчитанной по потенциалам [32]. Интегралы столкновений атом — молекула, использованные в этих расчетах, взяты из [29]. Если при вычислении λ_{eff} взять интегралы столкновений атом — молекула, рассчитанные по потенциалам, найденным из экспериментов рассеяния пучков [22], то значение максимального коэффициента $\lambda_{\text{eff}}^{\text{max}}$ еще более возрастет (до 4,44 Вт/(м·К)) по сравнению с экспериментальным значением ($\sim 4,02$ Вт/(м·К)). Если одновременно с применением потенциалов взаимодействия атом — молекула, полученных из рассеяния пучков, использовать потенциалы атом — атом [32], то $\lambda_{\text{eff}}^{\text{max}}$ будет еще выше. Если же для интегралов столкновений атом — молекула взять потенциалы взаимодействия, найденные в модели ААП с потенциалами изолированных атомов (кривая 2 на рис. 2), то значение $\lambda_{\text{eff}}^{\text{max}}$ упадет до 3,48 Вт/(м·К), а соответствующая кривая λ_{eff} (7 на рис. 8) пройдет ниже всех экспериментальных точек.

В области температур выше 11 000 К экспериментальные данные по коэффициенту теплопроводности могут служить критерием выбора сечений резонансного обмена при расчете интегралов столкновений ионов с одноименными атомами. Разброс экспериментальных точек по коэффициенту теплопроводности, вообще говоря, превышает расхождение в результатах численных расчетов λ_{eff} за счет разброса в интегралах столкновений ион — одноименный атом при использовании различных методик расчета сечений обмена, так что однозначные выводы по рекомендации тех или иных сечений обмена сделать затруднительно. Хотя если для анализа из серии экспериментальных точек по коэффициенту теплопроводности азота (см. рис. 9) при температурах $T \sim 12\,000$ — $14\,000$ К и воздуха (см. рис. 8) при $T \sim 11\,000$ — $12\,000$ К исключить точки, превышающие результаты [12, 14] из-за возможного завышения экспериментальных значений коэффициента теплопроводности, обстоятельный анализ которого проводится в [14], то лучшее совпадение с экспериментами дает расчет, в котором использованы сечения обмена, найденные наиболее последовательными квантово-механическими расчетами [37] (кривая 1 на рис. 8 и рис. 9).

Таким образом, представленные на рис. 6—9 коэффициенты переноса вязкости и теплопроводности оказываются в наилучшем согласии с данными экспериментов как по сравнению с расчетами, проводившимися с другим набором интегралов столкновений, так и по сравнению с расчетами [46] (кривая 4 на рис. 8 и 9), которые, очевидно, являются заниженными, поскольку расчеты [46] выполнены в первом ненулевом приближении, и [47] (кривая 6 на рис. 8). Это согласие может служить косвенным подтверждением возможности применения моделей, принятых при расчете интегралов столкновений компонентов воздуха, для более широкого круга многокомпонентных смесей:

1) при расчете свойств переноса химически равновесных смесей взаимодействие нейтральных компонентов — молекул можно задавать потенциалом, в котором область дальнедействующих взаимодействий должна быть обоснована достаточно строго, в то время как для описания короткодействующих сил допустимы более приближенные методики;

2) во взаимодействии нейтральных атомов и их ионов проявление дальнедействующих сил при расчете эффективных коэффициентов переноса химически равновесных смесей несущественно, поэтому выбор модели для описания дальнедействующих сил принципиального значения не имеет;

Таблица 4

Система	A, эВ	$\alpha \cdot 10^{10}$, м	Система	A, эВ	$\alpha \cdot 10^{10}$, м
N—N	648,0	3,314	O—O ₂	4652,0	4,051
O—O	1128,0	3,672	N—NO	393,3	2,954
N—O	855,0	3,493	O—NO	1887,0	3,671
O—N ⁺ , O ⁺ —N	1218,0	3,740	N ₂ —N ₂	405,4	2,559
O—O ⁺ для Q ^(2,s)	855,0	3,493	O ₂ —O ₂	13310,0	3,918
N—N ⁺ для Q ^(2,s)	923,4	3,562	N ₂ —O ₂	2185,0	3,241
N—N ₂	191,2	2,627	NO—NO	2295,0	3,261
O—N ₂	890,0	3,345	N ₂ —NO	940,5	2,906
N—O ₂	931,7	3,332	O ₂ —NO	55147,0	3,596

3) для расчетов сечений рассеяния атомов и их ионов более предпочтительны квантово-механические методы по сравнению с полуэмпирическими методиками, которые, правда, дают в ряде случаев неплохое согласие с экспериментом, но только путем последовательных квантово-механических расчетов можно оценивать погрешности, допускаемые при вычислении свойств;

4) при расчете свойств частично ионизованных смесей существенное влияние оказывают процессы резонансного обмена нейтрала с одноименно заряженной частицей, поскольку сечения Q_{ex} в несколько раз превышают $Q_{упр}^l$, рассчитанные без учета обмена, и точность расчета свойств переноса в этой области определяется в основном точностью сечений резонансного обмена.

Принятые при расчете переносных свойств воздуха интегралы столкновений нейтральных компонентов для температур выше 2000 К с погрешностью $\sim 1\%$ аппроксимируются простыми алгебраическими функциями:

$$Q^{(1,1)} = 0,5816\pi\zeta^{2,2405} \exp(-0,01337\zeta)/\alpha^2, \quad Q^{(2,2)} = \omega^{(2,2)} Q^{(1,1)},$$

$$\omega^{(2,2)} = 1,539 - 0,0672\zeta + 0,0032\zeta^2, \quad \zeta \leq 8,0,$$

$$\omega^{(2,2)} = 1,331 - 0,0166 \ln \zeta, \quad \zeta > 8,0.$$

Здесь $\zeta = \ln(A/kT) = \ln[1,1604A/(T/10^4)]$; A и α — параметры (их значения даны в табл. 4).

Аппроксимации $\omega^{(l,s)} = Q^{(l,s)}/Q^{(1,1)}$ следующих порядков l и s приводятся в [26]. Интегралы столкновений для резонансного обмена зарядом аппроксимируются соотношениями:

для N—N⁺ (по сечениям обмена [37])

$$\bar{Q}^{(1,1)} = 20,0 - 2,5 \lg(T/10^4) - 8,07 \lg^2(T/10^4)(10^{-20} \text{ м}^2),$$

$$\bar{Q}^{(1,2)} = 0,977\bar{Q}^{(1,1)}, \quad \bar{Q}^{(1,3)} = 0,960\bar{Q}^{(1,1)}, \quad \bar{Q}^{(1,4)} = 0,958\bar{Q}^{(1,1)},$$

$$\bar{Q}^{(1,5)} = 0,955\bar{Q}^{(1,1)}, \quad \bar{Q}^{(3,3)} = \bar{Q}^{(1,1)};$$

для O—O⁺ (по сечениям обмена [43])

$$\bar{Q}^{(1,1)} = 13,4 - 4,28 \lg(T/10^4) + 3,403 \lg^2(T/10^4)(10^{-20} \text{ м}^2),$$

$$\bar{Q}^{(1,2)} = 0,97\bar{Q}^{(1,1)}, \quad \bar{Q}^{(1,3)} = 0,95\bar{Q}^{(1,1)}, \quad \bar{Q}^{(1,4)} = 0,94\bar{Q}^{(1,1)},$$

$$\bar{Q}^{(1,5)} = 0,93\bar{Q}^{(1,1)}, \quad \bar{Q}^{(3,3)} = \bar{Q}^{(1,1)}.$$

Итак, несмотря на существование значительного разброса в исходной информации по взаимодействию частиц (неопределенность потенциальной энергии в некоторых диапазонах {R} составляет до 50% и более), ряд вычислительных процедур снижает общую погрешность расчета свойств: при

Таблица 5

Объект	Δ , %			
	T, К			
	300–2500	3000–7000	8000–11000	12000–18000
$Q^{l,s}$ (молекула — молекула)	1,5	2–5	10	10
$Q^{l,s}$ (атом — молекула)	—	5	5	5
$Q^{l,s}$ (атом — атом)	—	2	3	3
$Q^{l,s}$ (атом — ион)	—	12	12	15
λ_{eff}	1,5	2–5	8	13
μ	1,5	2	10	10

тройном интегрировании $Q^{(l,s)}(T)$ на вычисление углов $\chi(b, g)$ потенциал $V(R)$, задаваемый вне области наибольшего сближения $\{R_m\}$, влияет мало, и для экстраполяции потенциальной энергии пригодными оказываются различные типы моделей; при расчете сечений $Q^l(E)$ несуществен вклад в интеграл малых углов; при интегрировании сечений по энергиям несуществен вклад сечений при больших и малых энергиях. Кроме того, при расчете свойств переноса многокомпонентных смесей химически реагирующих газов неопределенность в интегралах столкновений в отдельных диапазонах температур для отдельных компонентов нивелируется присутствием в смеси одновременно молекул, атомов, ионов, электронов. Сравнение интегралов столкновений, рассчитанных по наиболее обоснованным известным методикам получения потенциалов взаимодействия, и сопоставление результатов расчета коэффициентов переноса, в которых использованы различные наборы интегралов столкновений, с данными экспериментов по теплопроводности и вязкости воздуха и азота в широких диапазонах температур показало пределы возможных погрешностей коэффициентов переноса, допускаемых в расчетах из-за неточной исходной информации. Полученные оценки вероятно-допускаемых погрешностей в интегралах столкновений $Q^{(l,s)}(T)$, принятых при расчете свойств переноса, и в коэффициентах λ_{eff} и μ воздуха приведены в табл. 5.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ферцигер Г., Капер Дж. Математическая теория переноса в газах.— М.: Мир, 1976.
2. Гирифельдер Дж., Кергисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей.— М.: ИЛ, 1961.
3. Devoto R. S. Transport properties of ionized monatomic gases // Phys. Fluids.— 1966.— V. 9, N 16.
4. Соколова И. А. Коэффициенты переноса и интегралы столкновений воздуха и его компонентов // Физическая кинетика.— Новосибирск: ИТПМ СО АН СССР, 1974.— Вып. 4.
5. Колесников А. Ф., Тирский Г. А. Уравнения гидродинамики для частично ионизованных многокомпонентных смесей газов с коэффициентами переноса в высших приближениях // Молекулярная газодинамика. V Всесоюз. конф. по динамике разреженных газов и молекулярной газовой динамике.— М.: Наука, 1982.
6. Васильевский С. А., Соколова И. А., Тирский Г. А. Точные уравнения и коэффициенты переноса для многокомпонентной смеси газов и частично ионизованной плазмы // ПМТФ.— 1984.— № 4.
7. Митчнер М., Кругер Ч. Частично ионизованные газы.— М.: Мир, 1976.
8. Spitzer L., Harm R. Transport phenomena in a completely ionized gas // Phys. Rev.— 1953.— V. 89, N 5.

9. Mason E. A., Monchick L. Heat conductivity of polyatomic and polar gases // *J. Chem. Phys.*— 1962.— V. 36, N 6.
10. Васильевский С. А., Соколова И. А., Тирский Г. А. Определение и вычисление эффективных коэффициентов переноса для химически равновесных течений частично диссоциированных и ионизованных смесей газов // *ПМТФ.*— 1986.— № 1.
11. Асиновский Э. И., Пахомов Е. П. Анализ экспериментальных данных по вязкости газов в области высоких температур // *ТВТ.*— 1970.— Т. 8, № 4.
12. Асиновский Э. И., Шабашов В. И. Экспериментальное исследование коэффициентов электропроводности и теплопроводности плазмы воздуха // *ТВТ.*— 1969.— Т. 7, № 2.
13. Devoto R. S., Bauder U. H. et al. Air transport coefficients from electric arc measurements // *Phys. Fluids.*— 1978.— V. 27, N 4.
14. Асиновский Э. И., Дроханова Е. В. и др. Экспериментальное и теоретическое исследование коэффициента теплопроводности и полного излучения плазмы азота // *ТВТ.*— 1967.— Т. 5, № 5.
15. Hermann W., Schade E. T. Transportfunktionen von Stickstoff bis 26000 K // *Z. Phys.*— 1970.— Bd 233.— S. 333.
16. Von Uhlenbusch J. Berechnung der Hateralfunktionen eines Stickstoff und Argon Plasmas aus gemessenen Bogendata // *Z. Phys.*— 1964.— Bd 179.— S. 347.
17. Morris J. C., Rudis R. R., Yos J. M. Measurements of electrical and thermal conductivity of hydrogen, nitrogen and argon of high temperatures // *Phys. Fluids.*— 1970.— V. 13, N 3.
18. Plantikow U. Bestimmung von Transportkoeffizienten des Stickstoffs bis 13000 K // *Z. Phys.*— 1970.— Bd 237.— S. 388.
19. Schreiber P. M., Hunter A. M., Benedetto K. R.* Measurement of nitrogen plasma transport properties // *AIAA J.*— 1972.— V. 10, N 5.
20. Raich J. C., Gillis N. S. The anisotropic interaction between nitrogen molecules from solid state data // *J. Chem. Phys.*— 1977.— V. 66.— P. 846.
21. Brunetti B., Liuti G. Study of the interactions of atomic and molecular oxygen with O₂ and N₂ by scattering data // *J. Chem. Phys.*— 1981.— V. 74, N 12.
22. Леонас В. Б. Исследование короткодействующих межмолекулярных сил // *УФН.*— 1972.— Т. 107, вып. 1.
23. Ree F. H., Winter N. W. Ab initio and Gordon—Kim interaction potentials for two nitrogen molecules // *J. Chem. Phys.*— 1980.— V. 73, N 1.
24. McRury T. R., Steel W. A., Berne V. J. Intermolecular potential models for anisotropic molecules with applications to N₂, CO₂ and benzene // *J. Chem. Phys.*— 1976.— V. 64, N 4.
25. Berns R. M., van der Avoird A. N₂—N₂ interaction potential from ab initio calculation to the structure of (N₂)₂ // *J. Chem. Phys.*— 1980.— V. 72, N 11.
26. Гордеев О. А., Калинин А. П., Комов А. Л. и др. Потенциалы взаимодействия, упругие сечения, интегралы столкновений компонентов воздуха для температур до 20 000 К. Обзоры по теплофизическим свойствам веществ/ТФЦ.— М.: ИВТАН, 1986.— № 5.
27. Rainwater J. C., Biolsi L., Biolsi K. J. Transport properties of ground state nitrogen atoms // *J. Chem. Phys.*— 1983.— V. 79.— P. 1462.
28. Гайдаенко В. И., Никулин В. К. Born — Mayer interatomic potential for atoms with $z = 2$ to $z = 36$ // *Chem. Phys. Lett.*— 1970.— V. 7.— P. 360.
29. Соколова И. А., Тирский Г. А. Расчет и аппроксимации интегралов столкновений компонентов смесей, содержащих атомы O, H, C, N, F, Na, S, Si и их соединения // Отчет Ин-та механики МГУ.— 1983.— № 2857.
30. Holstein T. Mobilities of positive ions in their parent gases // *J. Phys. Chem.*— 1952.— V. 56, N 7.
31. Беляев Ю. Н., Шапиро Е. Г., Ромашин К. В. Интегралы столкновений для нейтральных компонентов диссоциирующего воздуха // Отчет Ин-та механики МГУ.— 1978.— № 2043.
32. Cubley S. J., Mason E. A. Atom-molecular and molecular-molecular potentials and transport collisions integrals for high-temperature air species // *Phys. Fluids.*— 1975.— V. 18.— P. 1109.
33. Vanderslice J. T., Mason E. A., Lippincott E. R. Interactions between ground — state nitrogen atoms and molecules: the N—N, N—N₂, N₂—N₂ interactions // *J. Chem. Phys.*— 1959.— V. 30.— P. 129.
34. Vanderslice J. T., Mason E. A., Marsch W. G. Interactions between oxygen atoms and molecules: O—O, O—O₂ // *J. Chem. Phys.*— 1960.— V. 32, N 2.
35. Capitelli M., Ficocelli V. E. Collisions integrals of oxygen atoms in different electronic states // *J. Phys. B.*— 1972.— V. 5.— P. 2066.
36. Capitelli M., Devoto R. S. Transport coefficients of high-temperature nitrogen // *Phys. Fluids.*— 1973.— V. 16.— P. 1835.
37. Capitelli M., Lamanna U. The gerade-ungerate splitting N₂⁺ potentials: effect on the resonant charge transfer cross sections on nitrogen atoms // *Chem. Phys.*— 1977.— V. 19.— P. 269.
38. Thulstrup E. W., Andersen A. Configuration interaction studies of bound low-lying states of N₂⁻, N₂⁺, N₂²⁺ and N₂ // *J. Phys. B.*— 1975.— V. 8.— P. 965.
39. Думан Е. А., Смирнов Б. М. Таблицы сечений резонансной перезарядки ионов на атомах // *ТВТ.*— 1974.— Т. 12, № 3.

40. Knoff H., Mason E. A., Vanderslice J. T. Interaction energies, charge-exchange cross sections and diffusion cross sections for N — N⁺ and O—O⁺ collisions // J. Chem. Phys.— 1964.— V. 40.— P. 3548.
41. Беляев В. А., Брежнев Б. Г., Ерастов Е. М. Резонансная перезарядка ионов углерода и азота при низких энергиях // ЖЭТФ.— 1968.— Т. 54, вып. 5.
42. Люстерник В. Е., Лавуцев А. В. Обзор и экспериментальное уточнение данных по вязкости воздуха и аргона при температурах до 2000 К и атмосферном давлении // Термодинамические свойства вещества и материалов.— М.: Изд-во стандартов, 1978.— Вып. 12.
43. Beebe N. H. F., Thulstrup E. W., Andersen A. Configuration interactions of low-lying electronic states of O₂, O₂⁺, O₂²⁺//J. Chem. Phys.— 1976.— V. 64.— P. 2080.
44. Schreiber P. M., Hunter A. M., Benedetto K. B. Argon and nitrogen plasma viscosity measurements // Phys. Fluids.— 1971.— V. 12.— P. 2696.
45. Меккер Г., Баудер У. Определение переносных свойств плазмы // Свойства низкотемпературной плазмы и методы ее диагностики.— Новосибирск: Наука, 1977.
46. Yos J. M. Revised transport properties for high-temperature air and its components // AVCO Corp. Wilmington Mass. (USA), RT-65, 1965.
47. Kulik P. P., Panevin Y. G. Transport properties of thermally ionized air // 8th Intern. Conf. on Phenomena in Ionized Gases.— Vienna, 1967.

Поступила 27/1 1987 г.

УДК 537.2+533.591

ДИНАМИКА СВЧ-РАЗРЯДА В МОЛЕКУЛЯРНОМ ГАЗЕ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ

Е. Я. Коган, Б. Ю. Кузин
(Куйбышев)

1. Высокочастотный разряд в плотном газе ($\nu_e > \omega$) и подпороговом поле формируется в два этапа. Вначале возбуждается несамостоятельный разряд, инициируемый внешним источником ионизации. Развивающаяся в нем ионизационно-перегревная неустойчивость переводит его в режим самостоятельного. Те же стадии определяют перенос пробоя в газе, т. е. формирование волны ионизации. Несамостоятельный разряд в невозмущенных областях газа связан здесь с переносом энергии из области установившегося разряда [1—3]. В режим самостоятельный разряд переходит на нелинейной стадии ионизационно-перегревной неустойчивости — на стадии ее насыщения. Поэтому анализ этой стадии позволяет оценить установившиеся параметры разряда и его пространственно-временную структуру.

Нелинейная стадия ионизационно-перегревной неустойчивости характерна тем, что экспоненциальный рост плотности плазмы сменяется взрывным, а в этих условиях диффузия частиц и тепла не стабилизирует неустойчивость [4]. Здесь имеется в виду эволюция возмущения в нелинейном режиме с обострением [5—7], в котором развитие неустойчивости в диссипативной системе приводит к уменьшению пространственного и временного масштабов распределения параметров.

На данной стадии при достаточно общих предположениях эволюция параметров газа и плазмы следует уравнению [4]

$$(1.1) \quad \partial P / \partial t = \partial^2 P / \partial x^2 + f(P)$$

($f(P)$ — нелинейная функция параметра P). Можно показать, что в условиях пробоя газа в подпороговом СВЧ-поле при достаточно общих предположениях $f(P) = P^\alpha$ ($\alpha > 1$). Тогда простой анализ размерности уравнения позволяет оценить пространственный Δx и временной Δt масштабы распределения: $\Delta t \sim P^{-(\alpha-1)}$, $\Delta x \sim P^{-(\alpha-1)/2}$, откуда вытекает, что неустойчивость не насыщается в нелинейном режиме, а возмущение коллапсирует.

Приведенный анализ не учитывает, что взаимодействие электромагнитного поля с плазмой характеризуется собственными пространственными масштабами — скин-слоем λ и длиной поглощения энергии поля $1/\mu$.