

Изменение энергии электрического поля внутри металла

$$\Delta W_{in} = W_{in}(\Delta S/S + 2\Delta E_0/E_0).$$

При постоянном заряде

$$\Delta E_0 = -E_0\Delta S/S, \quad \Delta W_{in} = -W_{in}\Delta S/S = -\frac{\varepsilon E_0^2}{8\pi} \delta S \frac{\xi}{R}.$$

В равновесии полное изменение энергии при смещении поверхности должно быть равно нулю, т. е.

$$-E_0^2 S \xi / 8\pi + 2\gamma_0 S \xi / R - \frac{\varepsilon E_0^2}{8\pi} \delta S \frac{\xi}{R} = 0$$

или

$$2(\gamma_0 - \Delta\gamma)/R = E_0^2/8\pi \quad (\Delta\gamma = \varepsilon \delta E_0^2/16\pi).$$

Значения $\Delta\gamma$ для различных металлов приведены в таблице, причем δ вычислялась по (2), а E_0 — по формулам, предложенным в [7].

Таким образом, в электрическом поле γ незначительно уменьшается (в предельных полях на 10 ÷ 20 %), причем из-за некоторой неопределенности ε значение $\Delta\gamma$ рассчитано не очень точно. Однако автор надеется, что появятся публикации, в которых эта проблема будет рассмотрена более подробно.

ЛИТЕРАТУРА

1. Дудников В. Г., Шабалин А. Л. Электрогидродинамические эмиттеры ионов // ПМТФ. — 1990. — № 2.
2. Melngailis J. Focused ion beam technology and application // J. Vac. Sci. Technol. — 1987. — V. B5, N 2.
3. Шабалин А. Л. О размере эмиссионной зоны электрогидродинамического эмиттера ионов // ДАН СССР. — 1988. — Т. 303, № 2.
4. Коваленко В. П., Шабалин А. Л. О нижней границе величины тока ЭГД-эмиттера // Письма в ЖТФ. — 1989. — Т. 15, № 6.
5. Мюллер Э. В., Цонг Т. Т. Полевая ионная микроскопия. — М.: Наука, 1980.
6. Радциг А. А., Смирнов Б. М. Справочник по атомной и молекулярной физике. — М.: Атомиздат, 1980.
7. Автоионная микроскопия/Под ред. Дж. Рена и С. Ранганатана. — М.: Мир, 1971.

г. Новосибирск

Поступила 25/IV 1991 г.

УДК 533.6.011.8

Г. А. Рувев, В. М. Фомин, М. Ш. Шавалиев

СТРУКТУРА УДАРНЫХ ВОЛН В ТРОЙНЫХ СМЕСЯХ ГАЗОВ С СИЛЬНО РАЗЛИЧАЮЩИМИСЯ МАССАМИ МОЛЕКУЛ

На основе уравнений трехскоростной трехтемпературной газодинамики [1] проведено численное исследование задачи о структуре ударной волны (УВ) в тройной смеси газов с соотношением молекулярных масс $m_1 \ll m_2 \sim m_3$. Приведены профили скоростей и температур компонентов смеси при числах Маха от 2 до 4 и различных значениях параметров смеси. Из них следует, что внутри УВ возникают сильное разделение и большие разности температур не только между легкими и тяжелыми газами, но и между тяжелыми компонентами смеси. Профили температур тяжелых компонентов смеси немонотонные.

1. Введение. Структура УВ в смесях газов с сильно различающимися массами молекул не может быть корректно описана в рамках классических уравнений Навье—Стокса [2]. Здесь необходимо привлечь уравнения многоскоростной многотемпературной газодинамики смесей газов, в которой каждый компонент (или группа компонентов) смеси характеризуется собственными макроскопической скоростью и температурой. На основе таких уравнений задача о структуре УВ в бинарных смесях с

сильно различающимися массами молекул ($m_1/m_2 \ll 1$, m_i — масса молекулы i -го сорта) детально исследована в [2, 3]. В частности, показано, что внутри УВ возникает сильное пространственное разделение компонентов смеси, а профиль температуры тяжелого газа при малой его концентрации является немонотонным.

В данной работе рассмотрена задача о структуре УВ в тройной смеси газов, состоящей из легкого и двух тяжелых газов с близкими массами молекул ($m_1 \ll m_2 \sim m_3$). Систематическое исследование этой задачи до сих пор не проведено, есть лишь отдельные результаты. В [4] для предельного случая малой примеси тяжелых газов, когда влиянием тяжелых молекул на несущий легкий газ можно пренебречь, изучена зона релаксации за фронтом УВ. В [5] методом прямого статистического моделирования Монте-Карло проведен расчет структуры УВ при $m_1 : m_2 : m_3 = 1 : 5 : 10$, $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3$ (σ_i — молекулярные диаметры) и параметрах набегающего потока: $M_0 = 5$, $n_1^0 : n_2^0 : n_3^0 = 100 : 2 : 1$ (M_0 — число Маха, n_i^0 — плотности числа молекул компонентов смеси). В обоих случаях получено существенное разделение тяжелых компонентов по скоростям.

В установках по газодинамическому разделению газовых смесей и изотопов (разделительное сопло [6], газодинамический разделительный элемент [7]) также реализуются течения тройной смеси, состоящей из легкого газа-носителя и разделяемой бинарной смеси тяжелых газов. В [1] показана возможность возникновения в таких течениях больших диффузионной скорости и разности температур между тяжелыми компонентами смеси, отсутствующих в теории Чепмена—Энскога, и сделан вывод о необходимости использования уравнений трехскоростной трехтемпературной газодинамики. Представляет интерес проверить эти результаты в случае простейшего течения, как в плоской УВ.

2. Исходная система уравнений и постановка задачи. Система уравнений трехскоростной трехтемпературной газодинамики в одномерном случае имеет вид [1]

$$(2.1) \quad \begin{aligned} \partial \rho_i / \partial t + \partial \rho_i u_i / \partial x &= 0, \quad i = 1, 2, 3, \\ \rho_i \left(\frac{\partial}{\partial t} + u_i \frac{\partial}{\partial x} \right) u_i &= - \frac{\partial p_i}{\partial x} - \sum_{j=1}^3 K_{ij} u_{ij} + \frac{4}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_i \frac{\partial u_i}{\partial x} \right), \\ \frac{3}{2} n_i \left(\frac{\partial}{\partial t} + u_i \frac{\partial}{\partial x} \right) T_i &= - p_i \frac{\partial u_i}{\partial x} - \sum_{j=1}^3 [q_{ij} (T_i - T_j) - \beta_{ij} K_{ij} u_{ij}^2] + \\ &+ \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial x} \right) + \frac{4}{3} \mu_i \left(\frac{\partial u_i}{\partial x} \right)^2, \\ p_i &= n_i k T_i, \quad u_{ij} = u_i - u_j, \quad \beta_{ij} = \frac{T_i}{m_i} \left| \left(\frac{T_i}{m_i} + \frac{T_j}{m_j} \right) \right|. \end{aligned}$$

Здесь ρ_i , u_i , T_i — массовая плотность, скорость и температура i -го компонента; $n_i = \rho_i / m_i$; k — постоянная Больцмана. Коэффициенты K_{ij} и q_{ij} , характеризующие обмен импульсом и энергией между компонентами смеси, и парциальные коэффициенты вязкости μ_i и теплопроводности λ_i даются выражениями

$$(2.2) \quad \begin{aligned} K_{1i} &= K_{i1} = \frac{16}{3} \rho_1 n_i \Omega_{1i}^{(1,1)}, \quad q_{1i} = q_{i1} = 3 \frac{k}{m_i} K_{1i}, \quad i = 2, 3, \\ K_{23} &= K_{32} = \frac{16}{3} \frac{\rho_2 \rho_3}{m_2 + m_3} \Omega_{23}^{(1,1)}, \quad q_{23} = q_{32} = \frac{3k}{m_2 + m_3} K_{23}, \\ \mu_1 &= \frac{5}{8} k T_1 \left(\Omega_1^{(2,2)} + 2 \sum_{j=2}^3 \frac{n_j}{n_1} \Omega_{1j}^{(2,2)} \right)^{-1}, \\ \lambda_1 &= \frac{75}{32} \frac{k^2 T_1}{m_1} \left(\Omega_1^{(2,2)} + 5 \sum_{j=2}^3 \frac{n_j}{n_1} \Omega_{1j}^{(1,1)} \right)^{-1}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mu_{ii} &= p_i a_{jj} a^{-1}, \quad \mu_{ij} = -p_j a_{ij} a^{-1}, \quad i, j = 2, 3, j \neq i, \\
\lambda_{ii} &= \frac{5}{2} \frac{k p_i}{m_i} b_{jj} b^{-1}, \quad \lambda_{ij} = -\frac{5}{2} \frac{k p_j}{m_j} b_{ij} b^{-1}, \\
a &= \det(a_{ij}), \quad b = \det(b_{ij}), \quad i, j = 2, 3, \\
a_{ii} &= \frac{8}{5} n_i \Omega_i^{(2,2)} + \frac{32}{3} n_1 \frac{m_1}{m_i} \Omega_{1i}^{(1,1)} + \frac{16}{5} n_j M_{ji} \left(M_{ji} \Omega_{ij}^{(2,2)} + \frac{10}{3} M_{ij} \Omega_{ij}^{(1,1)} \right), \\
a_{ij} &= \frac{16}{5} n_i M_{ij} \left(M_{ji} \Omega_{ij}^{(2,2)} - \frac{10}{3} \Omega_{ij}^{(1,1)} + \frac{4}{3} M_{ij} \frac{T_i - T_j}{T_i} \Omega_{ij}^{(2,2)} \right), \\
b_{ii} &= \frac{16}{15} n_i \Omega_i^{(2,2)} + 16 n_1 \frac{m_1}{m_i} \Omega_{1i}^{(1,1)} + \frac{64}{15} n_j M_{ji}^2 \left[M_{ij} \Omega_{ij}^{(2,2)} + \frac{5}{4} M_{ji} \left(1 + 3 \frac{m_i}{m_j} \right) \Omega_{ij}^{(1,1)} \right], \\
b_{ij} &= \frac{64}{15} n_i M_{ik} M_{ji}^2 \left(\Omega_{ij}^{(2,2)} - 5 \Omega_{ij}^{(1,1)} \right), \quad M_{ij} = \frac{m_i}{m_i + m_j}.
\end{aligned}$$

При выводе (2.1) и (2.2) оставлены члены низшего порядка в разложениях по m_1/m_i ($i = 2, 3$) и $u_{ij}/(2kT_i/m_i + 2kT_j/m_j)^{1/2}$ и отброшены члены, исчезающие в случае максвелловской модели молекул. Полные выражения даны в [1].

Требуется найти стационарное решение системы (2.1), удовлетворяющее граничным условиям

$$\begin{aligned}
(2.3) \quad (\rho_i, u_i, T_i) &\rightarrow (\rho_i^0, u_i^0, T_i^0), \quad x \rightarrow -\infty, \\
(\rho_i, u_i, T_i) &\rightarrow (\rho_i^1, u_i^1, T_i^1), \quad x \rightarrow +\infty
\end{aligned}$$

(индексом 0 обозначены параметры набегающего потока, величины с индексом 1 связаны с ними соотношениями Гюгонио для равновесной смеси).

Для проведения расчетов удобно перейти к безразмерным величинам

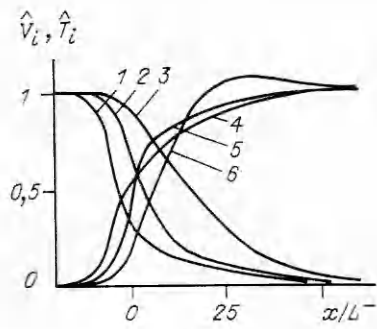
$$\begin{aligned}
\bar{\rho}_i &= \rho_i / \rho_i^0, \quad \bar{u}_i = u_i / \sqrt{T_i^0 T_i^0}, \quad \bar{T}_i = T_i / T_i^0, \quad \bar{p}_i = p_i / (\rho_i^0 R^0 T_i^0), \\
\bar{x} &= x / L^-, \quad \bar{t} = t \sqrt{R^0 T_i^0} / L^-, \quad R^0 = k n^0 / \rho^0
\end{aligned}$$

(u^0 — скорость набегающего потока). В расчетах использовалась модель твердых сфер, поэтому L^- взята из [8].

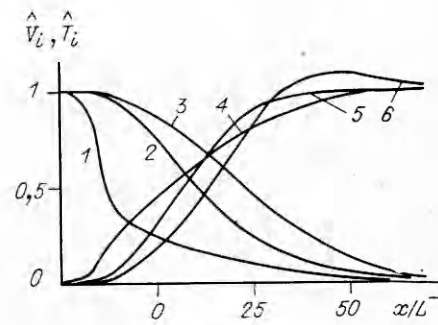
Ограничимся случаем малых концентраций тяжелых газов, когда $n_2 \sim n_3 \ll n_1$, но $\rho_1 \sim \rho_2 \sim \rho_3$. Уравнения (2.1) и граничные условия (2.3) после исключения членов $\sim n_i/n_1$ ($i = 2, 3$) и обезразмеривания примут вид (при этом $L^- = (2\lambda\sigma_1^2 n^0)^{-1}$)

$$\begin{aligned}
(2.4) \quad \frac{\partial \bar{\rho}_i}{\partial \bar{t}} + \frac{\partial}{\partial \bar{x}} (\bar{\rho}_i \bar{u}_i) &= 0, \quad i = 1, 2, 3, \\
\bar{\rho}_i \left(\frac{\partial}{\partial \bar{t}} + \bar{u}_i \frac{\partial}{\partial \bar{x}} \right) \bar{u}_i &= -\frac{\partial \bar{p}_i}{\partial \bar{x}} - \sum_{j=1}^3 \bar{K}_{ij} \bar{u}_{ij} + \frac{4}{3} \frac{\partial}{\partial \bar{x}} \left(\bar{\mu}_i \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial \bar{x}} \right), \\
\frac{3}{2} \frac{m_1}{m_i} \frac{\bar{\rho}_i}{c_1^0} \left(\frac{\partial}{\partial \bar{t}} + \bar{u}_i \frac{\partial}{\partial \bar{x}} \right) \bar{T}_i &= -\bar{p}_i \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial \bar{x}} - \sum_{j=1}^3 [\bar{q}_{ij} (\bar{T}_i - \bar{T}_j) - \beta_{ij} \bar{K}_{ij} \bar{u}_{ij}^2] + \\
&+ \frac{\partial}{\partial \bar{x}} \left(\bar{\lambda}_i \frac{\partial \bar{T}_i}{\partial \bar{x}} \right) + \frac{4}{3} \bar{\mu}_i \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial \bar{x}} \right)^2, \quad c_1^0 = \frac{\rho_1^0}{\rho^0}, \\
(2.5) \quad \bar{\rho}_i &= 1, \quad \bar{u}_i = \bar{u}^0 = \sqrt{5/3} M_{0x}, \quad \bar{T}_i = 1, \quad \bar{x} = -l, \\
\bar{u}_i &= \bar{u}^1, \quad \bar{T}_i = \bar{T}^1, \quad \bar{x} = +l.
\end{aligned}$$

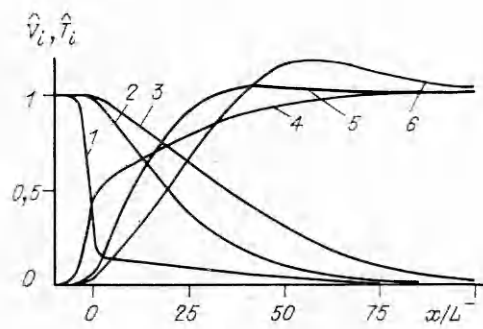
Значение l выбиралось на основе численных экспериментов таким образом, чтобы расширение области интегрирования не приводило к изменению результатов.



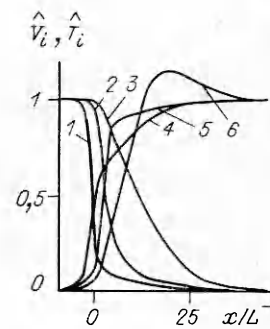
Р и с. 1



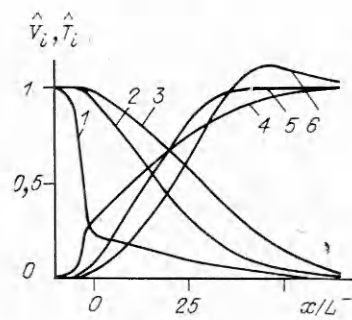
Р и с. 2



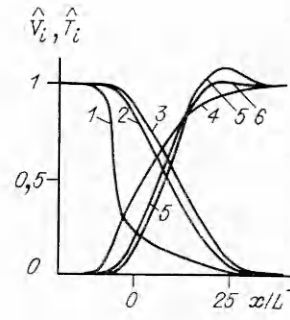
Р и с. 3



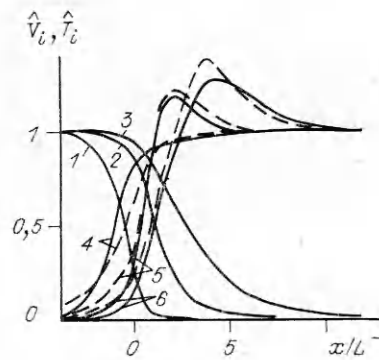
Р и с. 4



Р и с. 5



Р и с. 6



Р и с. 7

Безразмерные коэффициенты в (2.4) определяются следующими соотношениями:

$$\begin{aligned}\bar{\mu}_1 &= \frac{5}{8} \sqrt{\pi c_1^0 \bar{T}_1}, \quad \bar{\mu}_i = \frac{3}{8} \sqrt{\frac{\pi}{2} \frac{c_1^0}{\bar{T}_1} \left(\frac{\sigma_1}{\sigma_{1i}}\right)^2 \bar{\rho}_i \bar{T}_i}, \quad i = 2, 3, \\ \bar{\lambda}_1 &= \frac{15}{4c_1^0} \bar{\mu}_1, \quad \bar{\lambda}_i = \frac{5}{2c_1^0} \frac{m_1}{m_i} \bar{\mu}_i, \\ \bar{K}_{ij} = \bar{K}_{ji} &= \frac{4}{3} \frac{m_1}{m_i + m_j} (c_1^0)^{-3/2} \left(\frac{\sigma_{ij}}{\sigma_1}\right)^2 \sqrt{\frac{2m_1}{\pi} \left(\frac{\bar{T}_i}{m_i} + \frac{\bar{T}_j}{m_j}\right)} \bar{\rho}_i \bar{\rho}_j, \\ \bar{K}_{1i} = \bar{K}_{i1} &= \frac{4}{3} \frac{m_1}{m_i} (c_1^0)^{-3/2} \left(\frac{\sigma_{1i}}{\sigma_1}\right)^2 \sqrt{\frac{2}{\pi} \bar{T}_1 \bar{\rho}_1 \bar{\rho}_i}, \\ \bar{q}_{1i} = \bar{q}_{i1} &= \frac{3}{c_1^0} \frac{m_1}{m_i} \bar{K}_{1i}, \quad \bar{q}_{ij} = \bar{q}_{ji} = \frac{3}{c_1^0} \frac{m_1}{m_i + m_j} \bar{K}_{ij}\end{aligned}$$

(σ_i — диаметры молекул, $\sigma_{ij} = (\sigma_i + \sigma_j)/2$).

Уравнения (2.4), (2.5) решались методом установления, т. е. ищется решение нестационарных уравнений в системе координат, движущейся вместе с волной, с последующим выходом на стационарный режим. Для аппроксимации системы (2.4) использовалась неявная разностная схема расщепления по физическим процессам, подробно описанная для бинарной смеси в [9].

3. Результаты расчетов, обсуждение. Производились расчеты в диапазоне $M_0 = 2-5$ и при различных концентрациях, m_1/m_i и σ_1/σ_i ($i = 2, 3$). На рис. 1—7 даны профили нормированных относительных скоростей и температур компонентов смеси:

$$\widehat{V}_i = (\bar{u}_i - \bar{u}^1)/(\bar{u}^0 - \bar{u}^1), \quad \widehat{T}_i = (\bar{T}_i - 1)/(\bar{T}^1 - 1).$$

Плотности компонентов можно определить отсюда с помощью соотношений $\bar{\rho}_i \bar{u}_i = \bar{u}^0$. Начало отсчета выбрано в точке, где числовая плотность смеси изменялась наполовину от своего изменения в УВ, т. е. $n_1^0 \bar{\rho}_1 + n_2^0 \bar{\rho}_2 + n_3^0 \bar{\rho}_3 = 0,5n^0$ при $x = 0$ ($\bar{\rho}_i = (\bar{\rho}_i - 1)/(\bar{\rho}_i^1 - 1)$, $\bar{\rho}_i^1 = \bar{u}^0/\bar{u}^1$). На рис. 1—7 линия 1 — \widehat{V}_1 , 2 — \widehat{V}_2 , 3 — \widehat{V}_3 , 4 — \widehat{T}_1 , 5 — \widehat{T}_2 , 6 — \widehat{T}_3 . Параметры, при которых проведены расчеты, даны в таблице.

Из приведенных графиков можно установить некоторые особенности структуры УВ в смесях газов с соотношением молекулярных масс $m_1 \ll \ll m_2 \sim m_3$. При больших M_0 (рис. 4—6) или при очень малых концентрациях тяжелых газов (рис. 3) имеет место четко выраженная зона ударного перехода, в которой параметры легкого газа меняются резко, а параметры тяжелых газов — плавно. За ней следует протяженная зона релаксации, в которой смесь приходит в равновесное состояние за УВ.

Как и в случае бинарной смеси [2, 3], получены немонотонные профили температур тяжелых компонентов смеси. Внутри УВ есть область, где \widehat{T}_3 и \widehat{T}_2 или только \widehat{T}_3 превышают равновесную температуру за УВ (температурный пик). В зависимости от m_3/m_2 и σ_3/σ_2 больший температурный пик может приходиться на любой из тяжелых газов (например, при $\sigma_3/\sigma_2 = 1$ на самый тяжелый газ (рис. 5), а при $\sigma_3/\sigma_2 = 2$ на менее тяжелый газ (рис. 6)). В последнем случае происходит более интенсивное торможение самого тяжелого газа, а в первом — менее тяжелого газа. Температурный пик увеличивается как с ростом числа Маха (рис. 1, 4), так и с уменьшением концентрации тяжелых газов (рис. 2, 3). Механизм образования температурного пика в бинарной смеси объяснен в [2]. Аналогичный механизм работает и для тройной смеси.

При достаточно больших M_0 температурный пик возникает в обоих тяжелых компонентах смеси (рис. 7). На рис. 7 приведены также результаты [5] (штриховые кривые), полученные методом прямого статистического моделирования. Несмотря на то что сравнение результатов про-

Номер рисунка	M_0	$\frac{n_1^0}{n_2^0}$	$\frac{n_2^0}{n_3^0}$	$\frac{m_2}{m_1}$	$\frac{m_3}{m_2}$	$\frac{\sigma_2}{\sigma_1}$	$\frac{\sigma_3}{\sigma_2}$
1	2	100	1	20	4	2	1
2	3	100	1	100	2	2	1
3	3	300	1	100	2	2	1
4	4	100	1	20	4	2	1
5	4	100	1	100	2	2	1
6	4	100	1	100	2	2	2
7	5	50	2	5	2	1	1

ведено вне области применимости исходных уравнений (недостаточная малость отношений масс молекул m_1/m_i ($i = 2, 3$) и довольно большое значение числа Маха ($M_0 = 5$)), имеет место хорошее качественное совпадение для температур компонентов смеси.

Внутри УВ у компонентов смеси существенно различные скорости и температуры, что подтверждает высказанное выше предположение о необходимости применения уравнений трехскоростной трехтемпературной газодинамики. Сильное разделение по скоростям и температурам между легким и тяжелыми компонентами рассматриваемой тройной смеси объяснимо, как и для бинарной смеси, большой разницей в массах молекул. Разделение же между тяжелыми компонентами смеси вызвано в основном их взаимодействием с несущим легким газом.

Появление в УВ больших разностей скоростей и температур и температурного пика для смеси из сложных молекул может привести к усилению различных активационных процессов. В [10] показано, что в химически реагирующих смесях создание большой разницы температур легких и тяжелых молекул приводит к значительному различию скоростей прямой, где один из реагентов — легкая молекула, и обратной реакции и существенно увеличению выхода продуктов реакции. Учитывая результаты настоящей работы, можно ожидать возникновения аналогичных эффектов внутри УВ и при химических реакциях между тяжелыми молекулами смеси.

ЛИТЕРАТУРА

1. Шавалиев М. Ш. Уравнения многожидкостной гидродинамики для смесей газов. — Новосибирск, 1988. — (Препр./АН СССР, Сиб. отд-ние, ИТПМ; № 28—88).
2. Руев Г. А., Фомин В. М., Шавалиев М. Ш. Структура ударных волн в смесях газов с сильно различающимися массами молекул // ПМТФ. — 1989. — № 4.
3. Fernandez-Feria R., de la Mora J. F. Shock wave structure in gas mixtures with large mass disparity // J. Fluid Mech. — 1987. — V. 179.
4. Зельдович Я. Б., Генич А. П., Манелис Г. Б. Особенности поступательной релаксации во фронте ударной волны в газовых смесях // ДАН СССР. — 1979. — Т. 248, № 2.
5. Генич А. П., Куликов С. В., Манелис Г. Б. и др. Приложение весовых схем статистического моделирования течений многокомпонентного газа к расчету структуры ударной волны // ЖВММФ. — 1986. — Т. 26, № 12.
6. Ehrfeld W., Schelb W. Influence of nonequilibrium effects on isotope separation in real flow fields of separation nozzles // Rarefied Gas Dynamics/Boffi V., Cercignani C. — Stuttgart: Teubner, 1986. — V. 1.
7. Булгаков А. В. Газодинамическое разделение газовых смесей и изотопов во взаимодействующих потоках: Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. — Новосибирск: ИТ СО АН СССР, 1987.
8. Берд Г. Молекулярная газовая динамика. — М.: Мир, 1981.
9. Руев Г. А., Фомин В. М., Шавалиев М. Ш. Структура ударной волны в двухскоростной и двухтемпературной смеси вязких теплопроводных газов // ЧММСС. — 1986. — Т. 17, № 2.
10. Струминский В. В., Великодный В. Ю. О существенном увеличении скоростей химических реакций в неравновесных газовых смесях // ДАН СССР. — 1987. — Т. 293, № 5.

г. Новосибирск

Поступила 7/IX 1990 г.