

**РАСЧЕТ СОСТОЯНИЯ АРГОНА ЗА ПАДАЮЩЕЙ УДАРНОЙ ВОЛНОЙ
В ДИАПАЗОНЕ ЧИСЕЛ МАХА ОТ 20 ДО 50 С УЧЕТОМ ВОЗБУЖДЕНИЯ,
МНОГОКРАТНОЙ ИОНИЗАЦИИ И КУЛОНОВСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ**

Г. И. Козлов, Е. Л. Стуницкий

(Москва)

Представлены результаты расчетов параметров плазмы за падающей ударной волной в аргоне с учетом электронного возбуждения, трехкратной ионизации и уменьшения потенциала ионизации за счет кулоновского взаимодействия.

Система уравнений для падающей ударной волны с учетом трехкратной ионизации состоит из следующих семи уравнений, написанных в лабораторной системе координат: уравнение сохранения массы

$$\rho_1 V = \rho_2 (V - u_2)$$

уравнение сохранения импульса

$$p_1 + \rho_1 V^2 = p_2 + \rho_2 (V - u_2)^2$$

уравнение сохранения энергии

$$h_1 + \frac{1}{2} \rho_1 V^2 = h_2 + \frac{1}{2} \rho_2 (V - u_2)^2$$

уравнения закона действующих масс

$$x_1 = \left[1 + \frac{n_e}{K'} + \frac{K''}{n_e} \left(1 + \frac{K'''}{n_e} \right) \right]^{-1}, \quad x_2 = \frac{K''}{n_e} x_1, \quad x_3 = \frac{K'''}{n_e} x_2$$

уравнение состояния с учетом кулоновского взаимодействия [1]

$$p = \frac{\rho}{m} kT (1 + x_1 + 2x_2 + 3x_3) - \frac{e^3 \rho}{3m^{3/2}} \left(\frac{\pi \rho}{kT} \right)^{1/2} (2x_1 + 6x_2 + 12x_3)^{3/2}$$

Здесь V — скорость ударной волны; u_2 — скорость потока за ударной волной; ρ , p , T , h — соответственно, плотность, давление, температура и энтальпия (индексы 1 и 2 при указанных выше параметрах относятся к условиям перед и за ударной волной); K' , K'' , K''' — константы равновесия для процессов одно-, дву- и трехкратной ионизации; x_1 , x_2 , x_3 — соответственно, степени одно-, дву- и трехкратной ионизации, равные

$$x_j = \frac{n_j}{n_0 + n_1 + n_2 + n_3} \quad (j = 1, 2, 3)$$

Здесь n_j — число ионов j -й кратности в см^3 ; n_0 — число нейтральных атомов в см^3 ; n_e — число электронов в см^3 ; m — масса атома аргона; e — заряд электрона; k — постоянная Больцмана.

Выражение для удельной энтальпии одноатомного газа с учетом возбуждения, многократной ионизации и кулоновского взаимодействия можно записать в следующем виде:

$$h = \frac{5}{2} \frac{kT}{m} (1 + x_1 + 2x_2 + 3x_3) - \frac{4}{3} \frac{e^3}{m^{3/2}} \left(\frac{\pi \rho}{kT} \right)^{1/2} (2x_1 + 6x_2 + 12x_3)^{3/2} + \frac{1}{m} [J_1(x_1 + x_2 + x_3) + J_2(x_2 + x_3) + J_3 x_3] + \frac{1}{m} (1 - x_1 - x_2 - x_3) \frac{X^{(0)}}{Z^{(0)}} + \sum_j x_j \frac{X^{(j)}}{Z^{(j)}}$$

$$X^{(j)} = \sum_i g_i^{(j)} \varepsilon_i^{(j)} \exp \left(-\frac{\varepsilon_i^{(j)}}{kT} \right), \quad Z^{(j)} = \sum_i g_i^{(j)} \exp \left(-\frac{\varepsilon_i^{(j)}}{kT} \right)$$

Здесь $X^{(j)}$ — энергия возбуждения нейтрального атома и ионов; $Z^{(j)}$ — статистическая сумма нейтрального атома и ионов; $g_i^{(0)}$, ..., $g_i^{(3)}$ — статистические веса энергетических состояний; $\varepsilon_i^{(0)}$, ..., $\varepsilon_i^{(3)}$ — энергия энергетических уровней, отсчитываемая от

нижнего уровня нейтрального атома и ионов; J_1, J_2, J_3 — соответствующие потенциалы ионизации. В этой формуле первый член учитывает поступательную энергию, второй — кулоновское взаимодействие, третий — энергию, затраченную на ионизацию, последний член учитывает возбуждение уровней нейтрального атома и ионов.

Константы равновесия для процессов одно-, дву- и трехкратной ионизации с учетом возбуждения электронных уровней и снижения потенциалов ионизации за счет кулоновского взаимодействия определяются формулами статистической физики

$$K' = 2 \frac{Z^{(1)}}{Z^{(0)}} \frac{(2\pi m_e kT)^{3/2}}{h^3} \exp\left(-\frac{J_1 - \Delta E_1}{kT}\right)$$

$$K'' = 2 \frac{Z^{(2)}}{Z^{(1)}} \frac{(2\pi m_e kT)^{3/2}}{h^3} \exp\left(-\frac{J_2 - \Delta E_2}{kT}\right)$$

$$K''' = 2 \frac{Z^{(3)}}{Z^{(2)}} \frac{(2\pi m_e kT)^{3/2}}{h^3} \exp\left(-\frac{J_3 - \Delta E_3}{kT}\right)$$

Здесь m_e — масса электрона, h — постоянная Планка; ΔE_j — уменьшение потенциалов ионизации, которое в соответствии со статистическим рассмотрением методом Дебая — Хюккеля равно

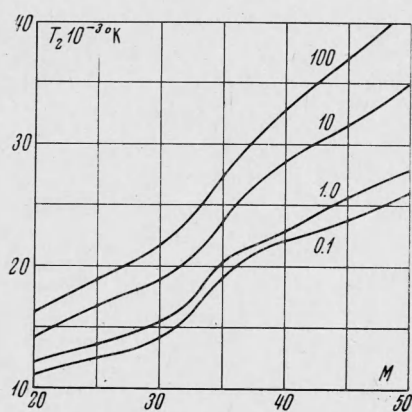
$$\Delta E_j = \frac{e^3}{3} \left(\frac{\pi\rho}{mkT}\right)^{1/2} (2x_1 + 6x_2 + 12x_3)^{1/2} \left(6j - \frac{2x_1 + 6x_2 + 12x_3}{1 + x_1 + 2x_2 + 3x_3}\right)$$

и, наконец, концентрация электронов равна

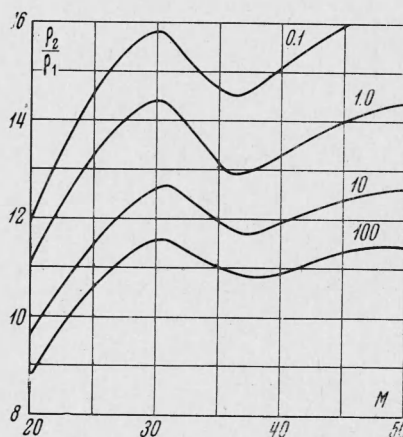
$$n_e = \rho/m(x_1 + 2x_2 + 3x_3)$$

Написанная выше система уравнений является замкнутой относительно своих неизвестных. При расчетах варьировались значения двух параметров: p_1 и M . В первом упрощенном варианте (без кулоновского взаимодействия) система решалась методом скорейшего спуска [2]. Полученные, таким образом, значения использовались далее в качестве первого приближения для решения полной системы методом Зайделя. При этом особое внимание уделялось выполнению условий сходимости для этого метода. Задача решалась на машине БЭСМ-3М.

Атомные константы для аргона были взяты из работы [3]. Расчет был выполнен для падающей ударной волны в интервале чисел M от 20 до 50 для следующих значений начального давления 0.1, 0.3, 1.0, 3.0, 10, 25, 50, 100 мм рт. ст. На фиг. 1—3 представ-



Фиг. 1



Фиг. 2

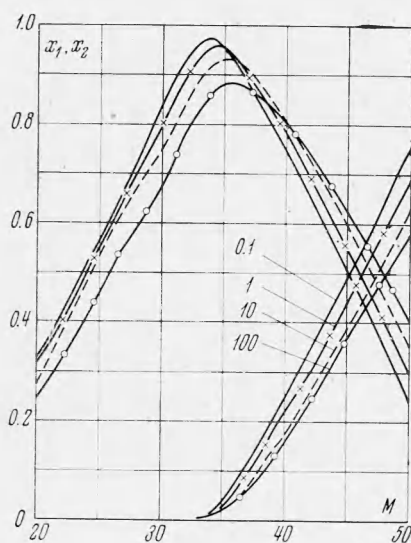
лена зависимость температуры, сжатия и степени ионизации за фронтом ударной волны от числа M для четырех значений начального давления. Степени ионизации приведены только для одно- и двукратной ионизации, так как в рассматриваемом диапазоне чисел M трехкратная ионизация за падающей ударной волной мала и даже для M , равного 50, и начального давления 0.1 мм рт. ст. составляет $2 \cdot 10^{-3}$.

Из фигур следует, что в области максимума однократной ионизации, где почти все атомы уже однократно ионизованы, а двукратная ионизация еще мала, основная доля энергии ударной волны затрачивается на увеличение температуры, что приводит к падению плотности. При дальнейшем увеличении становится существенным процесс двукратной ионизации, который замедляет рост температуры и приводит к увеличению плотности.

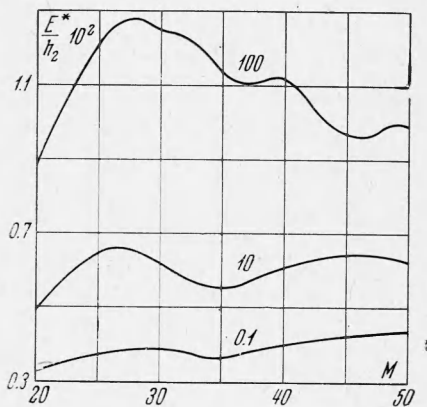
При расчете энергии возбуждения атома и ионов возникает вопрос о числе уровней, которые следует учитывать, так как в плазме конечной плотности происходит «срезание» верхних возбужденных уровней, а энергия электронного возбуждения пропорциональна числу уровней. К сожалению, в этом вопросе пока не существует единого мнения и различные оценки, которые можно сделать, дают разные результаты. Так, суммирование по уровням можно оборвать на таком значении n^* -главного квантового числа, при котором размеры орбиты электрона для водородоподобного иона становятся сравнимыми с дебаевским радиусом экранирования

$$n^* = \left(\frac{Z^2 kT}{4\pi n_e e^2 a_0^2} \right)^{1/4}$$

Здесь Z — заряд ядра, $a_0 = 0.53 \cdot 10^{-8}$ см — боровский радиус. Отсюда следует, что для газа, который находился, скажем, при комнатной температуре и давлении 100 мм рт. ст. и затем был нагрет в ударной волне с числом $M=20$, предельное значение $n^* = 8$.



Фиг. 3



Фиг. 4

Можно обрывать суммирование на таком уровне, где энергия связи электрона равна kT , так как в этом случае фактически каждое соударение со свободным электроном будет выбивать связанный электрон из атома [4]. Для водородоподобного иона энергия связи электрона E_n , находящегося на n -м уровне, равна его кулоновской энергии в поле ядра

$$E_n = \frac{J_H Z^2}{n^2}$$

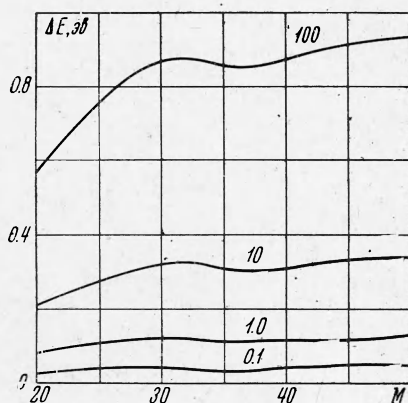
Здесь $J_H = 13.5$ эв — потенциал ионизации водорода. Приравняв эту энергию кинетической энергии электрона kT , находим, что для приведенных выше условий предельное значение $n^* = 3$. Из сделанных оценок видно, что неопределенность в значении числа учитываемых уровней слишком велика и заведомо перекрывает температурную зависимость для предельного значения n^* . Поэтому решено было учитывать первые пять уровней. Заметим, что к этому же результату приводят расчеты на основании известной теории Инглиса — Теллера.

На фиг. 4 представлена зависимость отношения энергии возбуждения к энтальпии газа от числа Маха для начальных давлений 1, 10, 100 мм рт. ст.

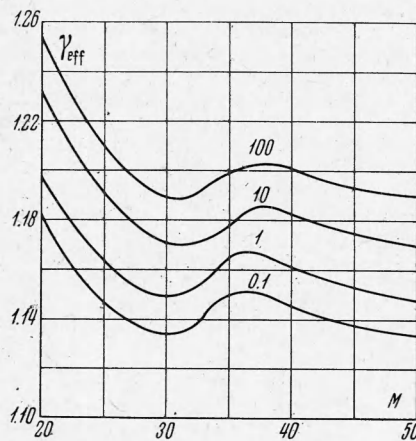
Из графиков следует, что при больших числах Маха и давлениях необходимо учитывать энергию электронного возбуждения при расчете параметров состояния газа.

Выше отмечалось, что при расчете термодинамических функций уменьшение потенциала ионизации учитывалось по статистической теории Дебая — Хюккеля. На фиг. 5 приведено снижение потенциала ионизации ΔE_1 , в зависимости от числа Маха ударной волны для различных начальных давлений.

Из графиков следует, что для больших начальных давлений, порядка 100 мм рт. ст. условие слабой неидеальности $\Delta E \ll kT$, являющееся критерием применимости метода Дебая — Хюккеля, строго говоря, уже не выполняется.



Фиг. 5



Фиг. 6

Представляет также интерес вычисление значения эффективного показателя адиабаты γ_{eff} . Введение γ_{eff} особенно целесообразно в тех случаях, когда его значение примерно оказывается постоянным, так как в этом случае можно пользоваться точными решениями для различных газодинамических задач. Эффективный показатель адиабаты вычисляется на основании расчетных значений термодинамических функций по следующей формуле:

$$\gamma_{eff} = 1 + p/\rho H$$

где H — удельная внутренняя энергия. На фиг. 6 представлена, полученная таким образом зависимость γ_{eff} от числа Маха ударной волны, которая свидетельствует о том, что изменение γ_{eff} весьма существенно, но в интервале чисел M от 25 до 50 изменение γ_{eff} невелико и для каждого значения начального давления составляет примерно $\pm 0,01$.

Авторы благодарят Ю. П. Райзера за ценные замечания.

Поступила 3 XI 1967

ЛИТЕРАТУРА

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика, т. 4. М., Гостехиздат, 1951.
2. Демидович Б. П., Марон И. А. Основы вычислительной математики. М., Физматгиз, 1963.
3. Мооге С. Е. Atomic energy levels. Washington, 1949, vol. 1.
4. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М., Изд-во «Наука», 1966.