

О ПРОЯВЛЕНИИ КВАНТОВЫХ ЭФФЕКТОВ ПРИ ВРАЩАТЕЛЬНОЙ РЕЛАКСАЦИИ СВОБОДНО РАСШИРЯЮЩЕГОСЯ ГАЗА

И. В. Лебедь, В. В. Рябов

(Жуковский)

Как известно, при расширении молекулярного газа в вакуум равновесие между поступательными и вращательными степенями свободы нарушается [1, 2]. «Отрыв» вращательной энергии газа от равновесного для данной кинетической температуры значения является следствием резкого понижения плотности газа вниз по потоку, что приводит к уменьшению количества газокинетических столкновений, испытываемых отдельными молекулами.

Существует и другая причина нарушения равновесия, носящая исключительно квантовый характер. При резком понижении кинетической температуры T_t , имеющем место при расширении газа в вакуум, параметр адиабатичности Мессе, характеризующий процесс обмена энергией между высоковозбужденными, не успевшими срелаксировать вращательными уровнями, становится больше единицы. Ниже некоторой (характерной для данного вращательного уровня) температуры в условиях адиабатичности столкновения вероятностно вращательного перехода начинают резко падать [3, 4]. Таким образом, с понижением T_t время вращательной релаксации τ_R будет возрастать.

В имеющихся теоретических работах по изучению распределения вращательной энергии вдоль потока расширяющегося азота (см., например, [5—7]) τ_R рассчитывалось в рамках классической механики. Однако при резком охлаждении газа T_t становится меньше расстояния между высоковозбужденными вращательными уровнями, и уже нельзя считать вращательный спектр молекулы непрерывным. Для эффективно заселенных при комнатной температуре вращательных уровней N_2 классический подход при расчете τ_R приводит к заметному искажению результата в диапазоне $T_t < 100$ К.

В данной работе проводится теоретическое исследование распределений вращательной и поступательной энергии вдоль оси струи расширяющегося в вакуум азота. При этом решается система газодинамических уравнений для модельной задачи расширения от сферического источника. Время вращательной релаксации газа в диапазоне низких T_t рассчитывается в рамках квантовой механики.

1. Рассмотрим процесс установления равновесия по вращательным состояниям при стационарном расширении от сферического источника невязкого нетеплопроводного азота. При расчетах молекула N_2 аппроксимируется жестким ротатором. Исходная система уравнений включает в себя уравнения непрерывности, движения, энергии и состояния [5]. Система замыкается релаксационным уравнением, записанным в τ -приближении:

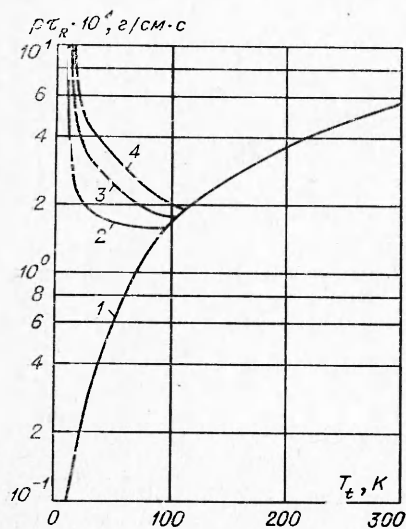
$$u dT_R/dr = (T_t - T_R)/\tau_R,$$

где r — расстояние от центра источника; u — скорость потока; $T_R = E_R/R$ (R — газовая постоянная, E_R — вращательная энергия одного моля газа). Отметим, что в процессе расширения больцмановский харак-

тер распределения по вращательным уровням нарушается [2], поэтому T_R не является характеристикой относительных заселенностей уровней.

Исходную систему уравнений удобно привести к безразмерному виду, отнеся все величины к их значениям на звуковой сфере, где число Маха $M = 1$. Тогда единственным параметром подобия задачи становится безразмерный параметр $\alpha = \rho^* u^* r^* / p^* \tau_R^*$, где ρ и p — плотность и давление газа, индекс * используется для обозначения величин на звуковой сфере.

В качестве граничных условий выберем $r/r^* = 1$, $T_t/T^* = 1$, $T_R/T^* = 1$. Предположим, что в некотором δ -слое у поверхности сферического источника, граница которого задается условием $M = 1,15$,



Фиг. 1

сверхзвуковое течение остается равновесным. Численное интегрирование замкнутой системы следует начать с границы δ -слоя. Использованный численный метод аналогичен тому, который применялся в [5].

2. Оценка τ_R проводится в рамках приближенных моделей. В модели Паркера [8] величина, обратная τ_R , определяется как отношение получаемой невращающимся ротатором вращательной энергии к энергии столкновения. При расчете, проведенном в рамках классической механики, полагалось, что ротаторы лежат в одной плоскости; считалось также, что каждый ротатор имеет два центра отталкивания, не совпадающих с центрами атомов, и один центр притяжения, находящийся в центре тяжести молекулы.

Кривой 1 на фиг. 1 представлен результат расчета времени релаксации

по формуле (43) из [8]. При расчете $p\tau_R$ использовались параметры потенциала взаимодействия молекул, приведенные в [8]. Кривая 1 может быть аппроксимирована степенной функцией

$$p\tau_R = CT_t^m$$

с параметрами $m = 1$ и $C = 1,65 \cdot 10^{-6}$ г/см·с·К, взятыми из [6].

При стремлении T_t к нулю $p\tau_R$ стремится к нулю. Это связано с тем, что обмен энергией между молекулами с большими моментами вращения более затруднен. Как следует из фиг. 1, классически рассчитанная $p\tau_R$ не проявляет тенденции к возрастанию при уменьшении T_t в условиях адиабатического обмена вращательной энергией.

Как известно, релаксационный процесс лимитируется переходами с эффективно заселенных при данных условиях высоковозбужденных вращательных уровней. Таким образом, в диапазоне низких T_t время релаксации энергии τ_R может быть аппроксимировано временем релаксации некоторого вращательного уровня j^*

$$(2.1) \quad p\tau_R = \frac{kT_t}{\sigma_0} \left(\frac{\mu}{8kT_t} \right)^{1/2} \frac{1}{\langle P_{j^*, j^*-2} \rangle},$$

где k — постоянная Больцмана; σ_0 — газокинетическое сечение; μ —

приведенная масса партнеров; $\langle P_{j^*, j^*-2} \rangle$ — средняя на одно газокинетическое столкновение вероятность перехода $j^* \rightarrow j^* - 2$.

До начала истечения при комнатной температуре максимум заселенности азота приходился на $j = 6$ вращательный уровень. Таким образом, если положить $j^* = 6$, то полученная оценка будет являться верхней границей τ_R . По-видимому, время релаксации $i = 4$ уровня в рассматриваемом случае можно считать нижней границей τ_R .

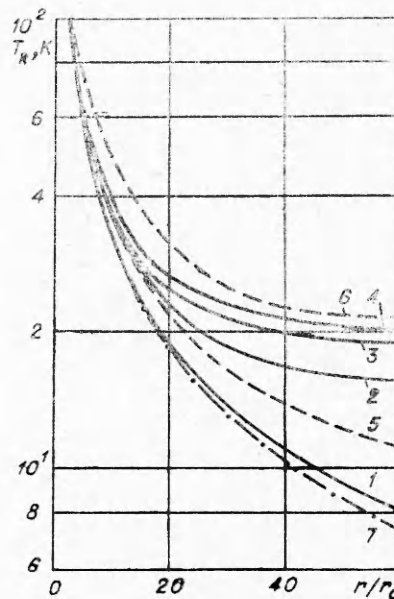
Общий метод расчета вероятностей вращательных переходов представлен в [3, 4]. Расчет $\langle P_{j^*, j^*-2} \rangle$ для $j^* = 4, 5, 6$ проведен по формуле (14) из [4]. При расчете использованы параметры потенциала, представленные в [8]. Учет высокой степени симметрии электронной оболочки N_2 позволил аппроксимировать параметр анизотропии первого не исчезающего члена c_2 в разложении межмолекулярного потенциала по полиномам Лежандра параметром анизотропии потенциала пары N_2 — бесструктурная частица: $c_2 = 0,5$ [9]. Единственным условием применимости (14) из [4] является условие адиабатичности, которое выполняется вплоть до температур, достигающих 100 К для $j^* = 4, 5, 6$.

Кривые 2 — 4 на фиг. 1 — результат расчета $p\tau_R$ по формуле (2.1) для $j^* = 4, 5, 6$ соответственно. Как следует из фиг. 1, $p\tau_R$, рассчитанное с помощью (2.1), растет с уменьшением T_t . В области T_t , где нарушается условие адиабатичности, кривые 2 — 4 плавно переходят в кривую 1, рассчитанную в рамках классической модели Паркера. Замена времени релаксации энергии временем релаксации уровня j^* , несмотря на приближенность, правильно качественно отражает характер процесса установления равновесия по вращательным состояниям — возрастание τ_R при уменьшении T_t .

3. На фиг. 2 представлены распределения T_R вдоль потока. Кривая 1 отвечает τ_R , рассчитанному в рамках классической механики, кривые 2 — 4 получены при использовании в качестве $p\tau_R$ кривых 2—4 фиг. 1 соответственно. При расчете полагалось $\alpha = 2730$.

Сравнение рассчитанных распределений с измеренными экспериментально может быть проведено, если учесть, что решение газодинамических уравнений, описывающих расширение газа от сферического источника, удовлетворительно передает поведение течения вблизи оси струи, вытекающей из круглого отверстия. Критический радиус источника однозначно связан с радиусом выходного отверстия струи r_c : $r^* = Ar_c$, $A = 1,15$ для N_2 [10]; $\alpha = 2730$ соответствует $p_0 r_c = 240$ мм рт. ст. · мм при $T_0 = 290$ К, где p_0 и T_0 — давление и температура торможения. В рассматриваемом случае влиянием вязкости на параметры газового потока можно пренебречь.

На фиг. 2 кривыми 5, 6 представлены результаты измерения T_R вдоль потока (кривая 5 взята из [1], 6 — из [2]). Отметим, что результаты, полученные в [1], занижены, так как чувствительность аппаратуры эксперимента не позволила зарегистрировать ту часть спектра люминесценции, которая



Ф и г. 2

соответствует возбужденным вращательным уровням N_2 . Представленные в [2] результаты несколько завышены, так как «горячий» фоновый газ либо участвовал в релаксационном процессе, затормаживая его, либо вносил свой вклад в спектр люминесценции.

Таким образом, экспериментальные кривые 5, 6 являются верхней и нижней границами распределения вращательной энергии вдоль потока. Они образуют своеобразную «вилку», в которую попадают лишь кривые, рассчитанные с учетом квантового характера обмена вращательной энергией. Как следует из фиг. 2, использование классических моделей при расчете τ_R приводит к заниженным в несколько раз значениям T_R .

Кривая 7 на фиг. 2 — температурная характеристика изэнтропического расширения азота из круглого отверстия, рассчитанная вдоль оси струи в предположении, что функция распределения по вращательным состояниям сохраняет бoльцмановский вид, т. е. $E_R = RT_t$.

Результаты расчетов и экспериментов, представленные на фиг. 2, демонстрируют наличие значительного «отрыва» вращательной энергии от равновесного для данной температуры значения и указывают на необходимость использования квантовых представлений при описании вращательной релаксации в расширяющемся потоке азота.

Авторы выражают благодарность В. Н. Гусеву и М. Н. Когану за обсуждение работы.

Поступила 16 I 1978

ЛИТЕРАТУРА

1. Marrone P. V. Temperature and density measurements in free jets and shock waves. «Phys. Fluids», 1967, vol. 10, N 3.
2. Борзенко Б. Н., Карелов Н. В., Ребров А. К., Шарафутдинов Р. Г. Экспериментальное исследование заселенности вращательных уровней молекул в свободной струе азота. — ПМТФ, 1976, № 5.
3. Лебедь И. В., Никитин Е. Е. Деактивация вращательно возбужденных молекул галогеноводородов. — «Докл. АН СССР», 1975, т. 224, № 2.
4. Лебедь И. В., Уфимский С. Я. Вращательная релаксация сильно возбужденных молекул. — ХВЭ, 1976, т. 10, № 6.
5. Сковородко П. А. Вращательная релаксация при расширении газа в вакуум. — В кн.: Динамика разреженных газов. Новосибирск, изд. Ин-та теплофизики СО АН СССР, 1976.
6. Лукьянов Г. А. Вращательная релаксация в свободно расширяющейся струе азота. — ПМТФ, 1972, № 3.
7. Repetski J. J., Mates R. E. Rotational temperature in an underexpanded jet. — «Phys. Fluids», 1971, vol. 14, N 2.
8. Parker J. G. Rotational and vibrational relaxation in diatomic gases. — «Phys. Fluids», 1959, vol. 2, N 4.
9. Scott P. B. Orientational averaging of rotational transition probabilities, computed using the sudden approximation. — «J. Chem. Phys.», 1973, vol. 58, N 2.
10. Гусев В. Н., Климова Т. В. Течение в истекающих из недорасширенных сопел струях. — «Изв. АН СССР. МЖГ», 1968, № 4.