

## КИНЕТИКА ДЕГРАДАЦИИ МОЛЕКУЛЯРНОГО ПУЧКА В ПОКОЯЩЕМСЯ ГАЗЕ

УДК 533

А. А. Морозов, М. Ю. Плотников, А. К. Ребров

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, 630090 Новосибирск

Проблема численного исследования полной деградации стационарного молекулярного пучка в покоящемся газе состоит в расчете и анализе полей параметров инжектируемых молекул, формирующихся в результате поступательной релаксации от максимальной неравновесности в точке инъекции к диффузионному дрейфу при температуре фонового газа. Многочисленные прикладные аспекты этой задачи относятся к различным стадиям деградации. Рассеяние пучка на первых столкновениях является предметом многолетних продолжающихся исследований, связанных с созданием аппаратуры, измерением сечений рассеяния и определением межмолекулярных сил [1, 2]. Значительная часть работ была посвящена формированию молекулярных пучков и определению их характеристик [3–5]. Деградация пучка определяет процессы перезарядки, возможности вывода электронных и ионных пучков, их очистки от нейтральных частиц, а также способы создания газоструйных заградительных мишеней [6–8]. Процессы газодинамического разделения при инъекции смеси газов и изотопов относятся к стадии существенной деградации инжектируемого потока частиц [9–12]. В задачах смешения газов, относящихся к вакуумным технологиям, интерес представляет полная характеристика процесса смешения инжектируемого газа с фоновым. К этому классу задач можно отнести, в частности, смешение молекулярного и сплошного потоков при взаимодействии факела ракетного двигателя с окружающей атмосферой на большой высоте [13]. Активное зондирование атмосферы молекулярным газом и электронными пучками, получение электронно-пучковой плазмы, распыление поверхности мишени высокоэнергетичными пучками включают завершающую стадию взаимодействия инжектируемого пучка с фоновым газом.

Эти процессы, описываемые математическими моделями, имеют общность кинетических явлений при трансформации функции распределения скоростей инжектируемого газа к максвелловской, соответствующей состоянию окружающего газа. В данной работе сделана попытка проследить весь процесс деградации молекулярного пучка в простейшей постановке: исследовать поступательную релаксацию однонаправленного односкоростного пучка молекул малой интенсивности, когда можно пренебречь импульсным и тепловым воздействием инжектируемых молекул на фоновый газ. Наиболее близкими по содержанию анализируемых физических процессов являются работы [14–17]. Непосредственно к направлению исследования данной работы относится [16].

**1. Постановка задачи.** Эффективным инструментом для решения сформулированной задачи является метод прямого статистического моделирования. Поскольку задача ограничена случаем малой интенсивности молекулярного пучка, то столкновения инжектируемых молекул между собой и их влияние на фоновый газ не учитывались. Процедура использования обычного метода Берда [18] модифицирована для более простого случая заданной максвелловской функции распределения скоростей молекул фонового газа. Численные эксперименты проводились в широком диапазоне масс инжектируемых легких ( $m_1/m_2 < 1$ ) и тяжелых ( $m_1/m_2 > 1$ ) молекул. Здесь  $m_1$  и  $m_2$  — массы молекул инжектируемого и фонового газов. Скорость пучка варьировалась от нуля до значений, превосходящих среднюю тепловую скорость фонового газа на порядок. Для описания взаимодействия молекул использовалась модель твердых сфер. Параметрами задачи являлись отношение

масс  $m_1/m_2$  и скоростное отношение  $S = u_1/V$ , где  $u_1$  — начальная скорость инжектируемого газа;  $V$  — наиболее вероятная тепловая скорость фонового газа.

Пространственное движение молекул прослеживалось в цилиндрическом объеме, на границе которого происходило полное поглощение инжектируемых молекул. Инжекция осуществлялась вдоль оси цилиндра. Размеры объема выбирались таким образом, чтобы не было существенного влияния границ объема на область релаксации инжектируемых молекул. С учетом геометрии задачи были введены цилиндрические координаты: ось  $x$  совпадает с направлением инъекции,  $r$  — расстояние до оси,  $\varphi$  — азимутальный угол. В качестве единицы длины была выбрана длина свободного пробега молекулы фонового газа  $l = 1/n\sigma\sqrt{2}$  ( $n$  — числовая плотность,  $\sigma$  — сечение столкновения молекул фонового газа), а в качестве единиц скорости и температуры — наиболее вероятная тепловая скорость и температура фонового газа. В зависимости от конкретной постановки численного эксперимента вычислялись траектории  $10^6 \div 10^7$  инжектируемых молекул. По накопленной информации о состоянии инжектируемых молекул в ячейках определялись их плотность  $n$ , среднемассовая скорость  $u$ , энергия  $E$  и температура  $T$ , а также вычислялись компонента температуры  $T_x$  (энергии  $E_x$ ), параллельная оси цилиндра, и перпендикулярная ей компонента  $T_y$  ( $E_y$ ). Это позволило провести анализ релаксации импульса, энергии и температуры по направлениям.

При любом отношении масс  $m_1/m_2$  справедливо утверждение: на бесконечном расстоянии от источника среднемассовое движение молекул имеет строго радиальный характер, как от некоторого фиктивного источника с центром, не совпадающим с положением точки инъекции. Расстояние от фиктивного источника до точки инъекции  $L_f$  определяется параметрами  $S$  и  $m_1/m_2$ . Величина  $L_f$  является интегральной характеристикой релаксационного процесса.

Для характеристики релаксационной зоны также использовано понятие релаксационной длины для энергии и импульса. В работе принято, что релаксационная длина для энергии  $L_r$  соответствует среднему расстоянию, на котором энергия инжектируемых молекул отличается от энергии фонового газа не более чем на 1%, а длина релаксации для импульса  $L_i$  определена как среднее расстояние, на котором компонента скорости молекулы в направлении инъекции изменяет свой знак. Эти величины однозначно связаны с персистенцией энергии и импульса.

**2. Анализ численных экспериментов.** Для проверки алгоритма численного решения поставленной задачи, в частности для выбора границ объема и шага пространственной сетки, в качестве тестовой задачи проведен анализ рассеяния и диффузии частиц, рождающихся в точке с начальной нулевой скоростью, что соответствует случаю релаксации и диффузии с абсолютной сферической симметрией.

На рис. 1, а показана эволюция функции распределения скоростей инжектируемых молекул  $G$  на расстояниях 0,2; 0,6; 2,3 длины свободного пробега для случая  $m_1/m_2 = 1$  в сравнении с максвелловской функцией распределения скоростей, соответствующей энергии («температуре») теплового движения молекул на выбранных расстояниях (сплошная линия соответствует максвелловской функции, а штриховая — функции распределения инжектируемых молекул). Максвеллизация инжектируемых молекул в основном завершается на трех длинах свободного пробега, а температура приближается к температуре фонового газа с отклонением примерно в 1% на расстоянии пяти длин свободного пробега (рис. 1, б). Характерной особенностью поведения температуры является превышение осевой компоненты температуры  $T_x$  над радиальной компонентой  $T_y$ .

На рис. 2 представлены результаты расчета для случая  $m_1/m_2 = 1$  и  $S = 1$ . При этом отношение энергии инжектируемых молекул к фоновым равно  $2/3$ . Поля плотности, температуры и энергии (рис. 2, а–в соответственно) определяют пространственное формирование релаксационной зоны. Изолинии параметров имеют грушевидную форму. Количе-

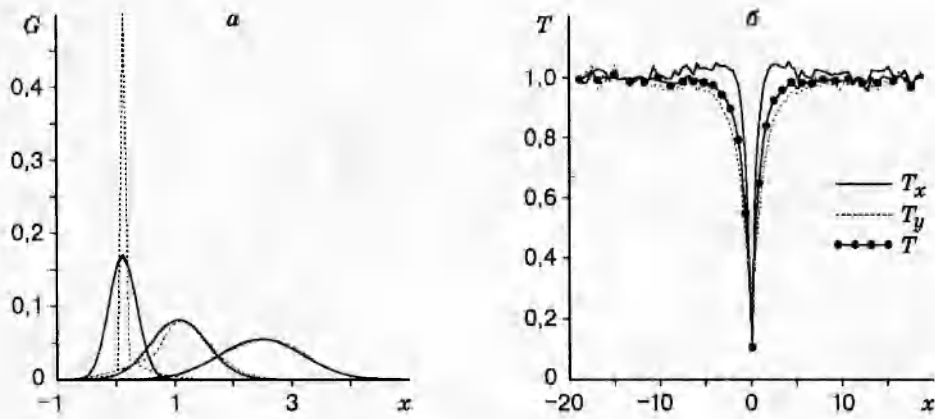


Рис. 1

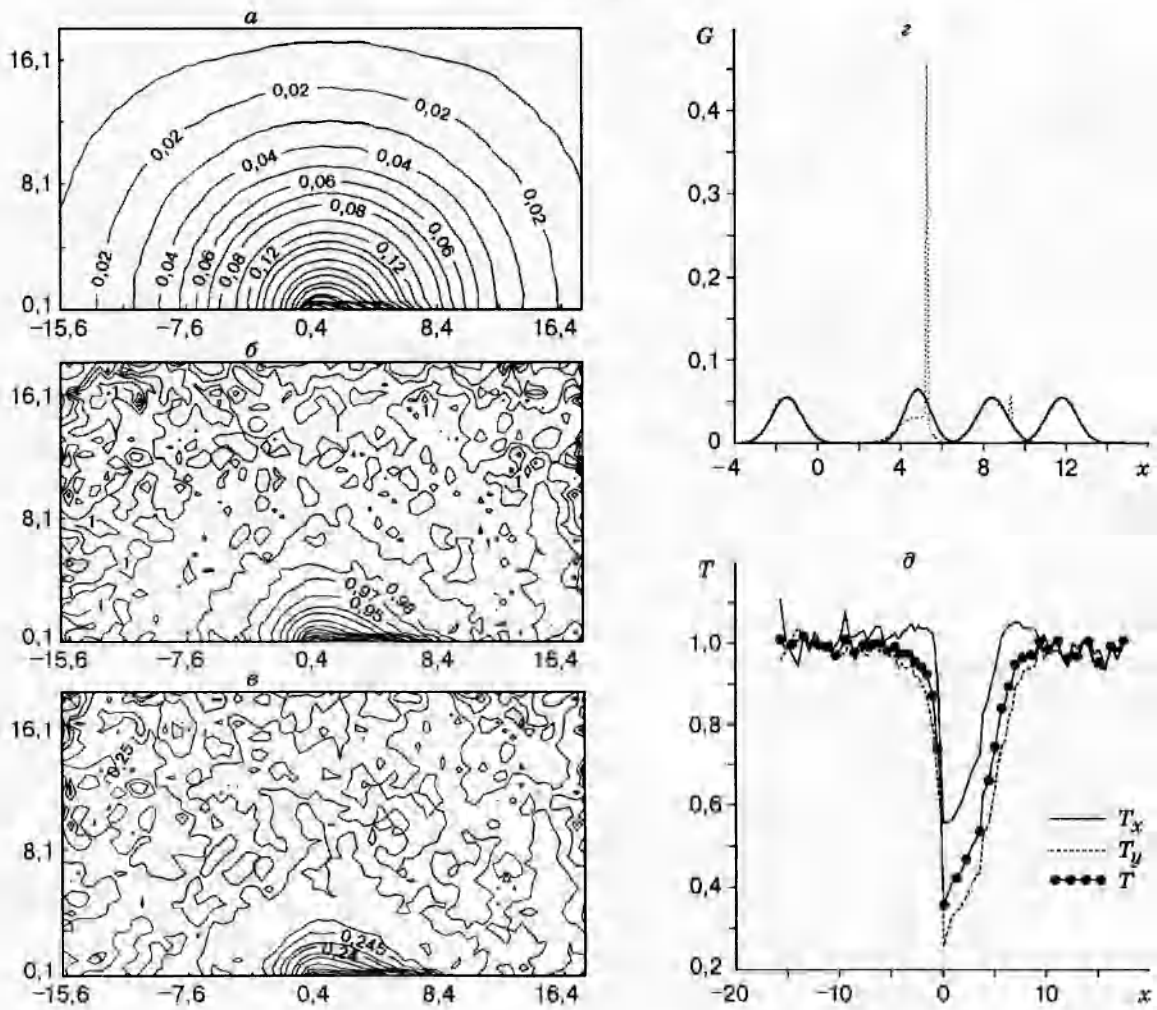


Рис. 2

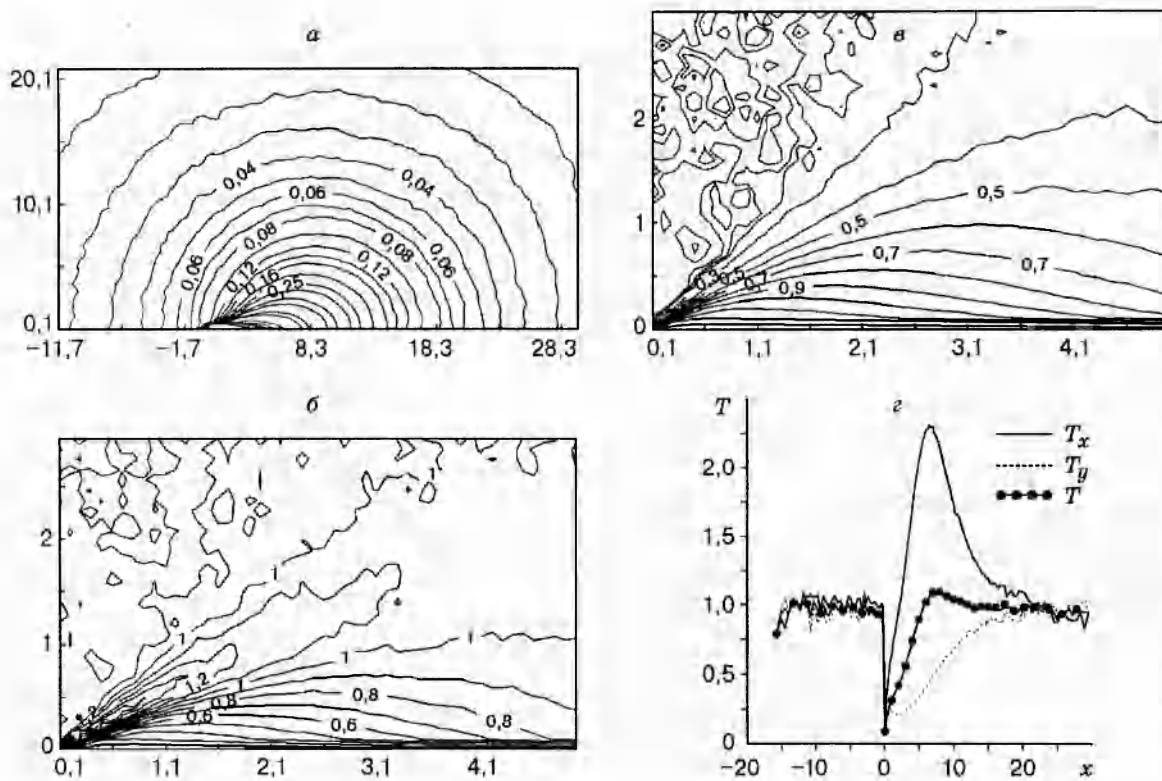


Рис. 3

ственно релаксационную зону можно характеризовать положением фиктивного источника на расстоянии примерно 1,4 длины свободного пробега фонового газа от точки инъекции, длиной релаксации энергии  $L_r \approx 2,8$  и импульса  $L_i \approx 2,6$ . На рис. 2,г показана эволюция функции распределения по линии инъекции (сплошная линия соответствует максвелловской функции распределения, штриховая — функции распределения инжектируемых молекул). След начальной дельта-функции исчезает на расстоянии порядка 10 длин свободного пробега по направлению инъекции. С тыльной стороны источника ансамбль инжектируемых молекул имеет функцию распределения, близкую к максвелловской. Компоненты температуры вдоль линии инъекции (рис. 2,д) монотонно возрастают в окрестности источника. Причем температура по направлению инъекции на некотором расстоянии несколько превышает температуру фонового газа. Здесь и далее значения температуры вдоль линии инъекции приведены для размеров ячеек вдоль оси вблизи источника, равных 0,25 длины свободного пробега фонового газа.

Полученные данные о максвеллизации функции распределения скоростей и интегральных характеристиках свидетельствуют об отсутствии сильной корреляции между преобразованием функции распределения и релаксацией энергии и импульса.

При изменении  $m_1/m_2$  и  $S$  в ту или другую сторону от единицы структура релаксационной зоны существенно меняется. Детальное описание полученных результатов выходит за рамки статьи, поэтому ограничимся представлением наиболее интересных данных для различных значений  $m_1/m_2$  и  $S$ , акцентируя внимание на анализе влияния энергии инжектируемого газа.

На рис. 3 показаны поле плотности во всем расчетном объеме (а), поля температуры (б) и энергии (в) на начальном участке релаксационной зоны, а также изменение компонент температуры по линии инъекции (г) при  $S = 1$  и  $m_1/m_2 = 10$ . Энергия инжектируемых молекул на порядок выше, чем в предыдущем случае. Положение фиктивного источ-

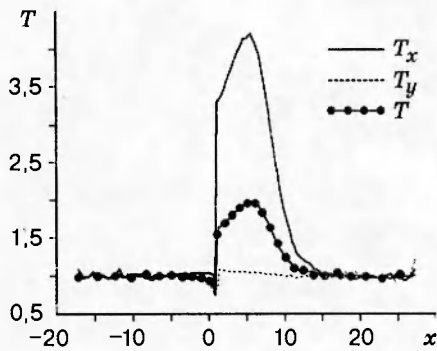


Рис. 4

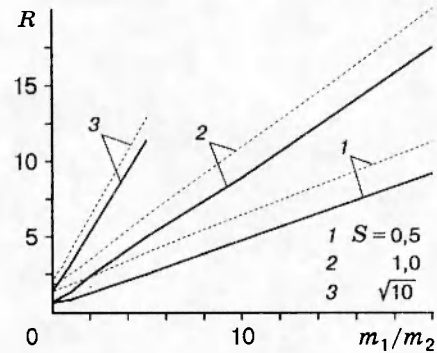


Рис. 5

ника сдвинуто по направлению инъекции и находится на расстоянии  $L_f \approx 8,9$  от точки инъекции, что соответствует сильной анизотропии релаксационной зоны. Особенностью температурного поля является немонотонность изменения температуры по нормали к линии инъекции (рис. 3,б). Экстремально высокую температуру имеет инжектируемый газ в окрестности некоторой поверхности, близкой к эллипсоиду, с осью вращения вдоль направления инъекции. Большая и малая оси эллипса как образующие равны примерно пяти и одной длинам свободного пробега. Внутри эллипсоида создается область с существенно неравновесным состоянием. Значение максимальной температуры уменьшается вниз по потоку от величин, примерно в полтора раза превышающих температуру фонового газа.

Разумеется, в рассматриваемой области имеет место суперпозиция движения рассеиваемых молекул пучка после первых столкновений и молекул, движущихся хаотично в фоновом газе. О сильном влиянии рассеиваемых молекул свидетельствуют два факта: а) монотонность уменьшения полной энергии инжектируемого газа при удалении от точки инъекции; б) наличие на первых 10 длинах свободного пробега максимума осевой компоненты температуры вдоль направления инъекции ( $T_x$  на рис. 3,г) со значением, более чем вдвое превышающим температуру окружающего газа. Этот эффект может быть достигнут только за счет молекул, еще не потерявших начального импульса, но претерпевших существенное торможение.  $T_y$  монотонно повышается до фоновых значений. Общая (или средняя) температура инжектируемого газа имеет максимум, несколько превышающий температуру фонового газа в окрестности фиктивного источника. Компоненты температуры  $T_x$  и  $T_y$  ведут себя аналогично компонентам температуры в ударной волне одноатомного газа на участке подъема температуры. Так как природа релаксации в обоих случаях одинакова, то обнаруженные особенности в поведении температур можно назвать ударными эффектами деградации пучка.

Полученные данные относятся к инъекции тяжелого газа в легкий. Ударные эффекты становятся более существенными, если инжектируемые и фоновые молекулы имеют одинаковые массы, а энергия инжектируемых молекул остается неизменной за счет увеличения их скорости ( $S = \sqrt{10}$ ) (рис. 4). Превышение температуры  $T_x$  над фоновой — более чем в 4 раза. Любопытно, что это превышение близко к тому, которое имеется при формировании ударной волны для одноатомного газа с числом Маха, близким к выбранному скоростному отношению. Изменение радиальной компоненты температуры носит монотонный характер, а общая температура имеет максимум, превышающий примерно вдвое температуру фонового газа.

Если при энергии, соответствующей обоим последним случаям, инжектировать молекулы с массой в 10 раз меньше, чем у фоновых молекул, то наблюдается аналогичный ударный эффект и значение максимальной температуры  $T_x$  даже выше, чем в предыдущем случае ( $(T_x)_{\max} \approx 6$ ). Но это существенно меньше величины, соответствующей

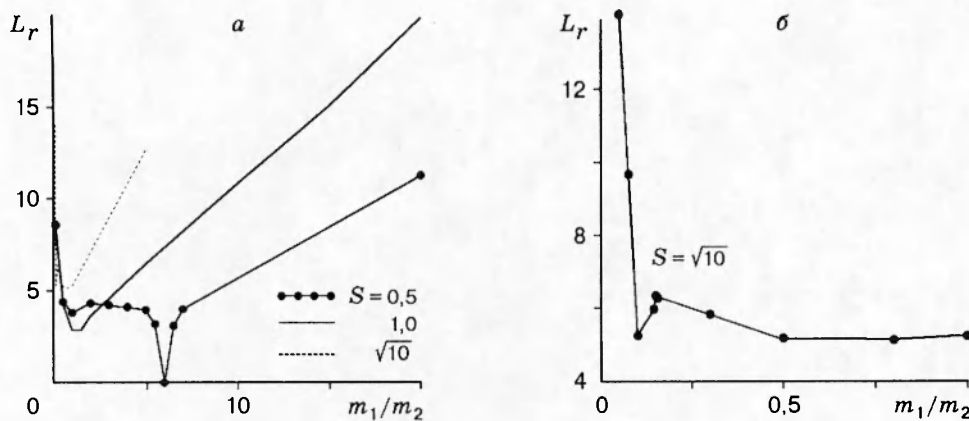


Рис. 6

торможению газа при числе Маха, близком к значению  $S$ . Более «мягкий» ударный релаксационный эффект обязан тому, что рассматриваемый процесс реализуется в смеси газов различных молекулярных масс.

Расчеты показывают, что если энергия инжектируемых молекул меньше энергии молекул фонового газа, то некоторое превышение осевой компоненты температуры над фоновой как для легких, так и тяжелых молекул наблюдается лишь в случае приближения энергии инжектируемых молекул к энергии молекул фонового газа.

Систематические исследования кинетики деградации молекулярных пучков позволяют привести достаточно информативные сведения об их интегральных характеристиках, в частности, уточнить данные, приведенные в [16]. Фиктивный источник всегда расположен в релаксационной зоне с существенной неравновесностью. Естественно, что формирование максвелловской функции распределения скоростей является более медленным процессом по сравнению с релаксацией моментов функции распределения низких порядков. Характерные размеры релаксационных зон растут с увеличением отношения масс молекул  $m_1$  и  $m_2$ . При  $m_1 > m_2$  релаксационная зона вытянута по направлению инъекции. При  $m_1 < m_2$  уменьшение отношения масс делает релаксационную зону более сферосимметричной.

На рис. 5 показаны расстояния от точки инъекции до фиктивного источника (сплошные линии) и длина релаксации импульса (штриховые линии) для  $S = 0,5; 1; \sqrt{10}$  в диапазоне отношений масс  $m_1/m_2$   $0,1 \div 20$ . Полученные данные подтверждают результаты работы [16]. Оказалось, что длина релаксации импульса явно коррелирует с положением фиктивного источника. Как и следовало ожидать, положение фиктивного источника и границы полной релаксации импульса при всех значениях  $S$  сдвинуто по направлению инъекции даже при  $m_1/m_2 \ll 1$ .

Поведение зависимости длины релаксации энергии  $L_r = G(m_1/m_2, S)$  имеет сложный характер (рис. 6, a). При  $m_1/m_2 \rightarrow 0$ ,  $m_1/m_2 \rightarrow \infty$  и фиксированном  $S$  значение  $L_r$  возрастает и наблюдаются два минимума. При  $S < 1$  один минимум находится в окрестности точки  $m_1 = m_2$ , что соответствует более быстрой релаксации при равенстве масс молекул, второй — в окрестности точки, отвечающей равенству энергий инжектируемого и фонового газов. Для  $S = 0,5$  минимум  $L_r$  при равных энергиях молекул оказался ярко выраженным. Для принятой расчетной границы релаксации энергии (отличие от энергии фонового газа составляет 1%)  $L_r \rightarrow 0$ . При  $S > 1$  минимум в окрестности точки с равными массами сохраняется. Положение второго минимума определяется особенностями релаксации легких молекул при больших скоростях инъекции. На рис. 6, б отдельно показано изменение  $L_r$  при  $S = \sqrt{10}$ . Минимальное значение  $L_r$  составляет пять — шесть длин свободного пробега, и второй минимум имеет место при энергии инжектируемых молекул,

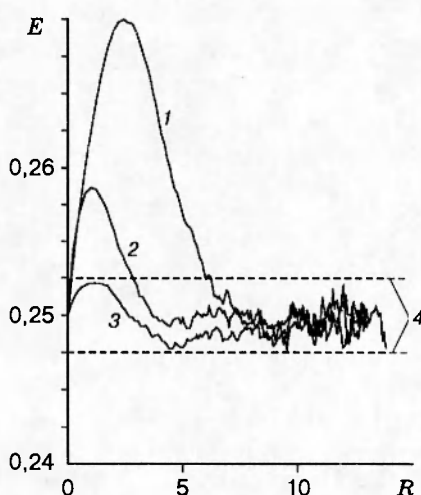


Рис. 7

которая меньше энергии молекул фонового газа.

Для объяснения обнаруженных особенностей был проведен расчет изменения энергии инжектируемых молекул в начальный период релаксации для различных масс молекул с энергией, равной энергии молекул фонового газа. На рис. 7 линия 1 соответствует случаю  $m_1/m_2 = 0,15$ ,  $S = \sqrt{10}$ ; линия 2 —  $m_1/m_2 = 1,5$ ,  $S = 1$ ; линия 3 —  $m_1/m_2 = 6$ ,  $S = 0,5$ ; линии 4 ограничивают область, в которой отклонение энергии от фонового значения меньше 1%. Оказалось, что релаксация легких молекул сопровождается заметной начальной накачкой энергии на расстоянии пяти первых длин свободного пробега. Например, при  $m_1/m_2 = 0,15$  энергия превосходит начальную примерно на 8%. Отсюда следует, что положение второго минимума при  $S > 1$  может не совпадать с точкой равенства энергий. Энергетическая накачка тяжелых молекул существенно уменьшается при увеличении массы инжектируемых молекул. При  $m_1/m_2 > 6$  накачка меньше 1%, т. е. процесс релаксации средней энергии тяжелых молекул, практически не возмущаемой столкновениями, может считаться завершенным на расстояниях от источника меньше одной длины свободного пробега.

В результате расчетов установлено, что длина релаксации энергии при равенстве энергий инжектируемых и фоновых молекул не является пространственной характеристикой релаксационной зоны, так как максвеллизация функции распределения скоростей молекул не имеет явной корреляции с релаксацией энергии. Зона релаксации функции распределения скоростей молекул, сколь угодно обширная по размерам в зависимости от  $m_1/m_2$  и  $S$ , может быть полностью изоэнергетической за границей первых пяти длин свободного пробега.

**Заключение.** Детальные и систематические исследования кинетики деградации молекулярного пучка в покоящемся газе на основе прямого статистического моделирования позволили установить качественные и количественные характеристики релаксации молекулярного пучка к тепловому равновесию с фоновым газом в диапазонах отношений масс инжектируемого и фонового газов  $0,1 \div 20$  и скоростных отношений инъекции  $0,5 \div \sqrt{10}$  для модели молекул в виде твердых сфер. Выводы о качественном характере деградации справедливы и для более широкого диапазона параметров. Установлено, что при энергии инжектируемых молекул, превосходящей энергию фонового газа, в процессе релаксации наблюдается ударный эффект, заключающийся в превышении тепловой энергии инжектируемого газа над энергией фонового газа. Ударные эффекты, оцененные по аналогии с торможением сверхзвукового потока, тем сильнее, чем ближе по массе молекулы ин-

жектурируемого и фонового газов. Обнаружена начальная накачка энергии инжектируемых молекул, более заметная для легких молекул. Установлена зависимость длины релаксации энергии от отношения масс и начальной скорости инжектируемых молекул.

Полученные данные позволяют оценить размеры области неравновесного смешения инжектируемого и фонового газов при малых значениях интенсивности потока молекул в пучке.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 95-01-1371).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Амдур И., Джордан Дж. Упругое рассеяние пучков высоких энергий. Межмолекулярные силы отталкивания // Исследования с молекулярными пучками. М.: Мир, 1969. С. 39–87.
2. Абрамовская М. Г., Басс В. П., Петров О. В., Токовой С. В. Измерение полных сечений рассеяния инертных газов в диапазоне относительных энергий 7–17 эВ // ПМТФ. 1988. № 4. С. 28–32.
3. Campargue R. Facteurs de degradation dominants dans la production de jets moleculaires supersoniques // Entropie. 1969. N 3. P. 15–21.
4. Covers T. R., LeRoy R. L., Deckers J. M. The concurrent effects of skimmer interactions and background scattering of the intensity of a supersonic molecular beam // 6th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. N. Y.: Academic Press, 1969. V. 2. P. 985–996.
5. Зарвин А. Е., Шарафутдинов Р. Г. Влияние газа окружающего пространства на функцию распределения скоростей молекул в молекулярном пучке // ПМТФ. 1976. № 4. С. 11–19.
6. Иванов В. П. О газокINETической очистке пучка ионов от нейтральных молекул // Журн. техн. физики. 1974. Т. 44, вып. 2. С. 380–386.
7. Devienne F. M. Etude du rendement des echanges de charge entre un jet moleculaire neutre et un faisceau d'ions // C. R. Acad. Sci. Paris. 1964. V. 256. P. 1497–1499.
8. Соколов В. Г., Тимошин И. Я. Импульсная пароматниевая перезаряднозаградительная мишень для мощных инжекторов атомов водорода. Новосибирск, 1987 (Препр. / СО АН СССР. Ин-т ядерной физики; № 81–87).
9. Anderson J. B. Low particle energy range // J. Chem. Phys. 1975. V. 63, N 4. P. 1504–1512.
10. Куснер Ю. С., Кутателадзе С. С., Приходько В. Г. и др. Инерционное газодинамическое разделение газовых смесей и изотопов // Докл. АН СССР. 1979. Т. 247, № 4. С. 845–848.
11. Paklin V. L., Rebrov A. K. General principles of inertial gas mixture separation // Progress in Astronautics and Aeronautics / 16th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics (Pasadena, 1988). Washington: AIAA, 1989. V. 117. P. 290–297.
12. Gallagher R. G., Anderson J. B. Isotope separation in crossed-jet systems // 11th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. Paris, 1979. V. 1. P. 629–637.
13. Лукьянов Г. А. Рассеяние гиперзвукового потока на сверхзвуковой струе газа при свободно-молекулярном режиме взаимодействия // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. 1973. № 1. С. 176–179.
14. Bird G. A. The diffusion of individual molecules within a gas // 15th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics (Grado, 1986). Stuttgart, 1986. V. 1. P. 400–409.
15. Aristov V. V., Shakhov E. M., Scattering of impulsive molecular beam in rarefied gas // Ibid. P. 266–275.
16. Паклин Б. Л., Ребров А. К. Взаимодействие молекулярного потока от точечного источника со сплошной средой // ПМТФ. 1995. Т. 36, № 5. С. 3–6.
17. Hamel V. B. Disparate mass mixture flow // 10th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. N. Y.: Techn. Pap., 1977. P. 171–195.
18. Берд Г. Молекулярная газовая динамика. М.: Мир, 1981.

Поступила в редакцию 30/XII 1996 г.