

УДК 333.6.6.011

ОБ АЭРОДИНАМИЧЕСКОМ УСКОРЕНИИ ТЯЖЕЛЫХ ЧАСТИЦ В СВЕРХЗВУКОВОЙ СТРУЕ БИНАРНОЙ СМЕСИ С СИЛЬНО РАЗЛИЧАЮЩИМИСЯ МАССАМИ КОМПОНЕНТОВ

А.В. Лазарев, К.А. Татаренко, Д.Н. Трубников

(кафедра физической химии; e-mail: tdn@phys.chem.msu.ru)

На основе моментного метода решения уравнения Больцмана с эллипсоидальной функцией распределения по скоростям рассмотрено аэродинамическое ускорение частиц тяжелого компонента смеси, находящегося в следовых количествах в легком газе-носителе. Получена простая аналитическая зависимость предельной средней скорости частиц тяжелого компонента от условий в источнике и постоянной C_6 ветви притяжения потенциала взаимодействия. Соотношение хорошо описывает данные разных экспериментов в том числе и при низких давлениях в источнике струи, при которых известные в настоящее время корреляционные соотношения неудовлетворительны.

Ключевые слова: уравнение Больцмана, метод моментов, существенно различающиеся массы, «скольжение» скоростей.

В настоящее время сверхзвуковые струи и молекулярные пучки благодаря своим уникальным свойствам играют важную роль в физико-химическом эксперименте как инструмент для приготовления молекул в заданном состоянии при решении широкого круга задач [1, 2]. В частности, для получения нейтральных частиц в основном состоянии используется аэродинамическое ускорение тяжелых частиц, находящихся в следовых количествах в легком газе-носителе (обычно He или H_2). Такие частицы являются объектами экспериментов по рассеянию в области энергий от 1 до 100 эВ (см., например, [3]) и напыления неорганических и органических пленок с заданными свойствами – полупроводниковых, фотопроводящих, электрохромных, тонкопленочных ФЭП и многих других. В обоих случаях важной характеристикой ускоренных частиц является их предельная кинетическая энергия. В случае осаждения из струй пленок их структура и морфология напрямую зависят от этого параметра [4–6].

Кинетическая энергия частиц может быть достаточно точно измерена. Однако для таких измерений необходима сложная экспериментальная техника и непростая процедура обращения свертки функции распределения по скоростям с рядом аппаратных функций. В связи с этим был развит ряд теоретических подходов к решению задачи об ускорении частиц в разгоняющих пучках. При этом важно получение простых и удобных оценок параметров струи. Строгий анализ релаксации поступательной энергии в сверхзвуковых струях смесей газов должен основываться на кинетической теории и является непро-

стым. Обычно это решение уравнения Больцмана моментным методом, который требует выбора представления для функции распределения. Простой и достаточно адекватной условиям эксперимента со струями является эллипсоидальная функция распределения по скоростям компонентов смеси.

Миллер и Андрес [7] первыми рассмотрели в рамках такого подхода модель с реалистическим потенциалом взаимодействия (Леннард–Джонс 6–12) и получили неплохое согласие с экспериментальными зависимостями «скольжения» скоростей и разности температур компонентов от условий в источнике струи. Кроме того, они предложили широко используемое экспериментаторами корреляционное соотношение, связывающее неравновесные параметры струи с условиями в источнике (давление, температура, диаметр сопла, характеристики смеси) и параметрами потенциала взаимодействия. В частности, была получена простая аналитическая зависимость предельного «скольжения» скоростей от так называемого параметра «скольжения» VSP (velocity slip parameter) – безразмерной комбинации условий в источнике, состава смеси и характеристики взаимодействия частиц. Нужно отметить, что эта аппроксимация основана на линеаризации интеграла столкновений в предположении малости величины «скольжения» скоростей и поэтому может описывать смеси только с достаточно эффективной релаксацией поступательной энергии, т.е. с не слишком различающимися массами компонентов при высоких давлениях и низких температурах в источнике. Это соответствует большой величине VSP. Хорошее

согласие с экспериментом достигается обычно при $VSP \geq 10$ [3].

Для описания смесей с существенно различающимися массами компонентов Шварц и Андрес [8] на основе такой же кинетической модели, как и в [7], учли «скольжение» скоростей в области двухмерности потока и нелинейность столкновительного члена относительно величины «скольжения». При этом рассматривались смеси с большой разницей масс $m_2 \ll m_1$ и следовыми количествами тяжелого компонента $c_1 \ll c_2$ (c_i – мольная доля компонента i). Предполагалось, что легкий газ-носитель расширяется изэнтропически. Численное решение уравнения сохранения импульса тяжелой частицы позволило получить зависимость средней предельной скорости тяжелого компонента от условий в источнике и характеристик взаимодействия. Аналитической аппроксимации, как в [7], получено не было.

Работы, основанные на той или иной разновидности метода Монте-Карло, были посвящены рассмотрению аэродинамического ускорения тяжелых частиц в разгоняющих пучках. В основном эти работы связаны с оценкой эффекта разделения изотопов и смесей [9–11], изучением кинетики расширения струи смеси газов [12] и сравнением результатов метода прямого моделирования Монте-Карло [13] с моментным методом решения Виллиса [14], Патча [15], Миллера и Андреса [7]. В работе [3] представлены простая теоретическая модель аэродинамического ускорения частиц тяжелого компонента в легком газе-носителе и ее приложение к расширению смесей Хе/Не и C_{60} /Не. продемонстрировано хорошее совпадение модельных вычислений и экспериментальных данных. Преимуществом этой модели является простота вычислений на лабораторном компьютере.

Цель нашей работы – получение простой аналитической зависимости предельной средней скорости частиц тяжелого компонента малой концентрации в разгоняющем пучке легкого газа-носителя от условий в источнике (давления, температуры, диаметра сопла, состава смеси) и потенциала взаимодействия частиц. Анализ выполнен на основе моментного метода решения уравнения Больцмана с учетом эффекта «скольжения» скоростей в области двухмерности потока и нелинейности столкновительного члена относительно величины «скольжения».

Моментные уравнения

Рассмотрим истекающую в вакуум стационарную сверхзвуковую осесимметричную N-компонентную

струи смеси одноатомных газов. Для описания расширения такой струи используем моментный метод решения уравнения Больцмана с эллипсоидальной функцией распределения по скоростям i -го компонента:

$$f_i(\vec{\xi}) = n_i (2\pi R_i T_{\parallel}^i)^{-1/2} (2\pi R_i T_{\perp}^i)^{-1} \exp \left[-\frac{(\xi - u_i)^2}{2R_i T_{\parallel}^i} - \frac{\rho^2}{2R_i T_{\perp}^i} \right] \quad (i = 1, \dots, N), \quad (1)$$

где $R_i = k_B/m_i$, k_B – постоянная Больцмана, m_i – масса молекулы i -го компонента. Газодинамические параметры i -го компонента струи определяются как моменты функции распределения:

$$n_i = \int f_i d\vec{\xi} \text{ – числовая плотность } (d\vec{\xi} = 2\pi d\xi \rho dr),$$

$$u_i = \frac{1}{n_i} \int \xi f_i d\vec{\xi} \text{ – продольная средняя скорость,}$$

$$T_{\parallel}^i = \frac{1}{n_i R_i} \int (\xi - u_i)^2 f_i d\vec{\xi} \text{ – параллельная кинетическая температура}$$

$$T_{\perp}^i = \frac{1}{n_i R_i} \int \rho^2 f_i d\vec{\xi} \text{ – перпендикулярная кинетическая температура}$$

Обычная процедура получения системы моментных уравнений в случае эллипсоидальной функции распределения по скоростям для двухмерного потока вблизи оси течения дает [16, 17]:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} [u_i^2 + 2R_i T_{\parallel}^i] + 2R_i T_{\parallel}^i \frac{d}{dr} [\ln(n_i r^2)] &= \frac{4R_i T_{\perp}^i}{r} + \frac{2I_{\xi}^i}{n_i}, \\ \frac{d}{dr} [u_i^2 + 3R_i T_{\parallel}^i + 2R_i T_{\perp}^i] + \\ + 2R_i (T_{\parallel}^i - T_{\perp}^i) \frac{d}{dr} [\ln(n_i u_i r^2)] &= \frac{I_{v^2}^i}{n_i u_i}, \end{aligned} \quad (2)$$

где r – координата вдоль оси струи, а I_{ξ}^i , $I_{v^2}^i$ и $I_{\rho^2}^i$ – моменты интеграла столкновений уравнения Больцмана, связанные с переносом импульса и энергии [18] (см. приложение (A.1)–(A.2)).

Определим безразмерные переменные:

$$r = Dx, u_i = \sqrt{\frac{k_B T_0}{m}} y_i, T_{\parallel}^i = T_0 t_{\parallel}^i, T_{\perp}^i = T_0 t_{\perp}^i,$$

где D – диаметр сопла, T_0 – температура в источнике, а $m = \sum_i m_i c_i$ – средняя молекулярная масса смеси.

Тогда система уравнений (2) запишется в виде:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left[y_i^2 + 2 \frac{m}{m_i} t_{\parallel}^i \right] &= 4 \frac{m}{m_i} \frac{t_{\perp}^i}{x} - 2 \frac{m}{m_i} t_{\parallel}^i a_2' + \frac{2 I_{\xi}^i}{n_i} \frac{mD}{kT_0}, \\ \frac{d}{dx} \left[y_i^2 + 3 \frac{m}{m_i} t_{\parallel}^i + 2 \frac{m}{m_i} t_{\perp}^i \right] &= \\ &= -2 \frac{m}{m_i} (t_{\parallel}^i - t_{\perp}^i) a_1' + \frac{I_{v^2}^i}{n_i u_i} \frac{mD}{kT_0}, \\ \frac{B}{m_i} \frac{dt_{\perp}^i}{dx} &= -2 \frac{B}{m_i} \frac{t_{\perp}^i}{x} + \frac{B}{m_i} t_{\perp}^i a_1' + \frac{1}{2} \frac{I_{\rho^2}^i}{n_i u_i} \frac{mD}{kT_0}, \end{aligned} \quad (3)$$

где $a_1' = \frac{d}{dx} \ln(n_i u_i r^2)$, $a_2' = \frac{d}{dx} \ln(n_i r^2)$.

Полагаем, что a_1' и a_2' изменяются по изэнтропическому закону, т.е.

$$\begin{aligned} a_1' &= \frac{1}{2} \left(3 - \frac{t_0}{1-t_0} \right) \frac{d}{dx} \ln t_0 + \frac{2}{x}, \\ a_2' &= \frac{3}{2} \frac{d}{dx} \ln t_0 + \frac{2}{x}. \end{aligned}$$

При этом

$$\begin{aligned} t_0 &= \frac{T}{T_0} = \left[1 + \frac{1}{3} M^2 \right]^{-1}, \\ \frac{n}{n_0} &= t_0^{3/2}, \quad y_0 = \sqrt{5} (1-t_0)^{1/2}, \end{aligned} \quad (4)$$

где n_0 – числовая плотность в источнике. Для вычисления t_0 следует задать зависимость числа Маха от расстояния от среза сопла $M = M(x = r/D)$. Мы используем зависимость, предложенную Ашкеназом и Шерманом [19]. Продолженная в дозвуковую область, как это сделано в [20], и «сшитая» в околзвуковой области с помощью линейной интерполяции, она имеет вид:

$$M(x) = \begin{cases} \left(\frac{x+1}{1,55} \right)^2, & -1 \leq x \leq 0,55; \\ 1 + \frac{1,81(x-0,55)}{0,45}, & 0,55 \leq x \leq 1; \\ y(x) - \frac{2}{y(x)} + \frac{10,74}{y^3(x)}, & x \geq 1, \end{cases} \quad (5)$$

где $y(x) = 3,26(x - 0,075)^{2/3}$.

С учетом этого после несложных преобразований (3) система принимает вид:

$$\frac{dy_i}{dx} + \frac{5}{2} \frac{m}{m_i} \frac{t_0'}{y_i} = \frac{F_1^i}{y_i},$$

$$\begin{aligned} \frac{dt_{\parallel}^i}{dx} + \frac{t_0'}{1-t_0} t_{\parallel}^i &= \frac{m_i}{m} F_2^i, \\ \frac{dt_{\perp}^i}{dx} + \left(\frac{3}{2} \frac{t_0'}{t_0} - \frac{t_0'}{2(1-t_0)} \right) t_{\perp}^i &= \frac{1}{2} \frac{m_i}{m} F_3^i, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} F_1^i &= \frac{I_{\xi}^i}{n_i} \left(\frac{m}{k_B T_0} \right) D, \\ F_2^i &= \frac{I_{v^2}^i - 2u_i I_{\xi}^i - I_{\rho^2}^i}{n_i y_i} \left(\frac{m}{k_B T_0} \right)^{3/2} D, \\ F_3^i &= \frac{I_{\rho^2}^i}{n_i y_i} \left(\frac{m}{k_B T_0} \right)^{3/2} D, \end{aligned} \quad (7)$$

Система уравнений (6) учитывает двухмерный характер течения вблизи сопла (члены, зависящие от t_0) и, кроме того, здесь не делается предположения о гиперзвуковом характере течения.

Основное приложение системы уравнений (6)–(7) – нахождение значений неравновесных параметров струи в точке x_1 , граничной с областью сферически-симметричного расширения. При этом для моментов от интеграла столкновений в (7) используется приближение линейное по температурной неравновесности $\gamma_{ij} - 1$ и квадратичное по «скольжению» скоростей s_{ij} (см. (А.4)). Следуя [19], мы полагали $x_1 = 2,5$. Точку начала интегрирования x_0 выбирали в дозвуковой области ($x_0 < 0,5$) таким образом, чтобы при ее движении вверх по течению решение системы уравнений (6)–(7) воспроизводило изэнтропические значения параметров (4). Если такая точка не найдена, то это значит, что число Кнудсена источника слишком велико, и метод моментов неприменим. Решая систему уравнений (6)–(7) в интервале $x_0 \leq x \leq x_1$, находим граничные условия $u_i(x_1)$, $T_1^i(x_1)$ и $T_{\perp}^i(x_1)$ для сферически-симметричной задачи – системы уравнений (1), замкнутой уравнением неразрывности

$$\frac{d}{dx} (n_i u_i x^2) = 0 \quad \text{или} \quad a_1' = 0 \quad \text{и} \quad a_2' = -\frac{1}{u_i} \frac{du_i}{dx}.$$

Необходимость этого этапа решения возникает в том случае, когда компоненты смеси имеют сильно различающиеся времена релаксации. Например, в случае малой примеси тяжелого компонента в легком газе-носителе, когда эффективное локальное число Кнудсена для тяжелого компонента в точке x_1 недостаточно мало. Если массы компонентов не слишком различаются, то необходимость в решении системы уравнений (6)–(7) отпадает, и условия в x_1 полагаются изэнтропическими.

Предельная средняя кинетическая энергия частиц тяжелого компонента

В этом разделе рассматривается интересный с точки зрения практических приложений случай бинарной смеси, когда тяжелый компонент $i = 1$ находится в малой примеси к легкому газу-носителю $j = 2$ (обычно He или H_2). В такой смеси легкий носитель имеет свойства, близкие к свойствам однокомпонентной струи или слегка возмущенные. Для описания тяжелой примеси необходимо учитывать два обстоятельства. Во-первых, существенными являются неравновесные процессы в двухмерной области течения струи [20]. Во-вторых, величина «скольжения» скоростей тяжелого и легкого компонентов уже не является настолько малой, что можно использовать линейное приближение для моментов от интеграла столкновений [8]. В этом случае момент от интеграла столкновений I_{ξ}^1 в уравнении для скорости системы уравнений (6) не разлагается по степеням s_{12} . Кроме того, будем считать, что все свойства струи, кроме скорости тяжелого компонента, меняются по изэнтропическому закону. Далее, учитывая, что $m_2 \ll m_1$ и $c_1 \ll c_2$, пренебрегаем в уравнении для скорости системы (6) членами порядка $m/m_1 \ll 1$ и получаем

$$y_1 \frac{dy_1}{dx} = F_1^1, \quad \text{где} \quad (8)$$

$$F_1^1 = c_2 \frac{m}{m_1} \pi^{-1/2} \frac{p_0 D}{k_B T_0} t_0^{5/2} \psi(s_{12}), \quad \text{а} \quad (9)$$

$$\Psi(s_{12}, z) = \int_0^{\infty} \left(\frac{z}{s_{12}} \right)^2 Q_{12}^{(1)} \left(z \sqrt{\frac{2k_B T_0}{\mu_{12}}} t_0^{1/2} \right) \times \\ \times \left[e^{-(z-s_{12})^2} (2zs_{12} - 1) + e^{-(z+s_{12})^2} (2zs_{12} + 1) \right] dz.$$

Здесь $Q_{12}^{(1)}(g)$ – эффективное сечение 1-го порядка (см. приложение (A.3)),

$$s_{12} = (y_0 - y_1) t_0^{-1/2} \left(\frac{\mu_{12}}{2m} \right)^{1/2} \quad \text{и}$$

$$y_0 = \sqrt{5(1-t_0)^{1/2}}.$$

При низких энергиях относительного движения частиц E_{12} , соответствующих условиям расширения струй, доминирующая роль в столкновениях принадлежит ветви притяжения потенциала взаимодействия. Представляя его в виде

$$U(R) = -\frac{C_6^{12}}{R^6},$$

для эффективного сечения будем иметь

$$Q_{12}^{(\ell)}(E_{12}) = 2\pi A_6^{(\ell)} \left(\frac{6C_6^{12}}{E_{12}} \right)^{1/3}$$

$$(A_6^{(1)} = 0,4341, \quad A_6^{(2)} = 0,3274 \quad [17]).$$

С учетом этого выражение (9) для F_1^1 принимает вид:

$$F_1^1 = c_2 \frac{m}{m_1} \pi^{-1/2} \frac{p_0 D}{k_B T_0} t_0^{13/6} Q_{12}^{(1)}(k_B T_0) \Psi_0(s_{12}), \quad \text{где} \quad (10)$$

$$\Psi_0(s_{12}) = s_{12}^{-2} \int_0^{\infty} z^{4/3} \times \\ \times \left[e^{-(z-s_{12})^2} (2zs_{12} - 1) + e^{-(z+s_{12})^2} (2zs_{12} + 1) \right] dz.$$

Отметим, что Шварц и Андрес [8] решали такое же уравнение (8) со столкновительным членом (10), в котором использовалась аппроксимация

$$\Psi_0(s_{12}) \approx 2s_{12} [(2,007)^6 + \pi^3 s_{12}^2]^{1/6}$$

с верными асимптотиками по s_{12} .

Предельное значение безразмерной скорости y_1^{∞} достигается при $x \rightarrow \infty$ (и $s_{12} \rightarrow \infty$ соответственно). При этом

$$\Psi_0(s_{12}) \approx 2\sqrt{\pi} s_{12}^{4/3}$$

и уравнение (8) принимают простой вид:

$$y_1 \frac{dy_1}{dx} = A_0 t_0^{3/2} (y_0 - y_1)^{4/3}, \quad (11)$$

$$\text{где } A_0 = 2c_2 \left(\frac{m}{m_1} \right) \left(\frac{\mu_{12}}{2m} \right)^{2/3} \frac{p_0 D}{k_B T_0} Q_{12}^{(1)}(k_B T_0).$$

Решение уравнения (11) при $x \rightarrow \infty$

$$y_1(x) \approx y_1^{\infty} - \frac{(\sqrt{5} - y_1^{\infty})^{4/3} A_0 b^{3/2}}{y_1^{\infty} x}, \quad (12)$$

где b – постоянная в асимптотике t_0 при $x \rightarrow \infty$: согласно (4) и (5) в этом случае $t_0 \approx b x^{-4/3}$ ($b = 0,2823$). Из (11) видно, что y_1^{∞} зависит от единственного параметра A_0 (безразмерная комбинация начальных условий, состава смеси и параметра C_6^{12} потенциала взаимодействия), что позволяет построить однопараметрическую аппроксимацию $y_1^{\infty} = y_1^{\infty}(A_0)$. Для этой система уравнений (6) с моментами от интеграла столкновений (7) в виде (A.4) решалась численно для смеси Хе(1%)–Не(99%) при условиях, соответствующих эксперименту Абауфа и др. [21]. Использован-

ное при вычислениях значение C_6^{XeHe} рассчитывалось из комбинационного правила

$$C_6^{XeHe} = (C_6^{He} C_6^{Xe})^{1/2} = 3,48 \cdot 10^{-59} \text{ эрг} \cdot \text{см}^6.$$

Значения C_6^{He} и C_6^{Xe} взяты из [22]. Затем, полученное при больших x решение y_1^∞ аппроксимировалось зависимостью

$$y_1^\infty = \sqrt{5} [1 - \exp(-a_0 A_0^{b_0})]. \quad (13)$$

Подгонка дала следующие оптимальные значения параметров: $a_0 = 0,696$ и $b_0 = 0,360$.

В размерных переменных выражение для предельной средней скорости тяжелого компонента (13) с учетом значений параметров аппроксимации a_0 и b_0 имеет вид:

$$u_1^\infty = \sqrt{\frac{k_B T_0}{m}} [1 - \exp(-0,696 A_0^{0,360})]. \quad (14)$$

Результаты и обсуждение

В работе представлена кинетическая модель аэродинамического ускорения бесструктурных частиц. В этой модели предполагается, что время релаксации внутренних энергий тяжелой частицы существенно превышает время поступательной релаксации перекрестных столкновений. Следовательно, связь между релаксацией вращательной и колебательной энергий и «скольжением» скоростей игнорируется. Такая модель должна давать удов-

летворительное описание ускорения бесструктурных частиц в пределах точности предположения о доминирующей роли ветви притяжения потенциала взаимодействия.

На рис. 1 представлены результаты классического эксперимента Абауфа и др. [21] по ускорению атомов Хе в Хе смеси Хе (1%) – Хе (99%) при $T_0 = 298$ К. Здесь же представлены для сравнения результаты различных теоретических подходов. Из рис. 1 видно, что наиболее точно совпадают с экспериментальными данными результаты численных решений системы уравнений (6), уравнения Шварца и Андреса [8] и наша аппроксимация. Отметим, что второе слагаемое в (12), связанное с учетом расстояния «сопло–скиммер», для условий эксперимента [21] не превышает 0,7% ($x = 39$), а формула (14) наряду с хорошей точностью аппроксимации проста и удобна в использовании. Формула Миллера и Андреса [7], как и следовало ожидать дает существенные отклонения в области низких значениях $p_0 D$.

На рис. 2 представлены результаты эксперимента и модельных расчетов по ускорению C_{60} в Хе [3]. В рамках этой модели молекула фуллерена рассматривалась как бесструктурные квазиатомы. В работе учтен капиллярный эффект сопла, в результате которого эффективное давление $p_{эф}$ на срезе сопла становится ниже давления торможения p_0 . Наш расчет с учетом $p_{эф}$, как видно из рисунка, более точно описывает экспериментальные данные. Приведенная на рис. 3 экспериментальная зависимость средней предельной кинетической энергии молекул C_{60} от температуры

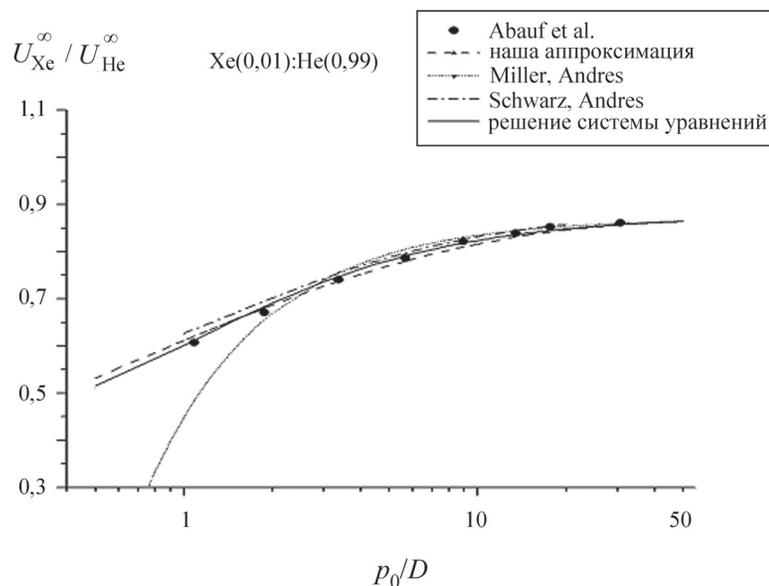


Рис. 1. Зависимость относительной предельной скорости ксенона от p_0/D

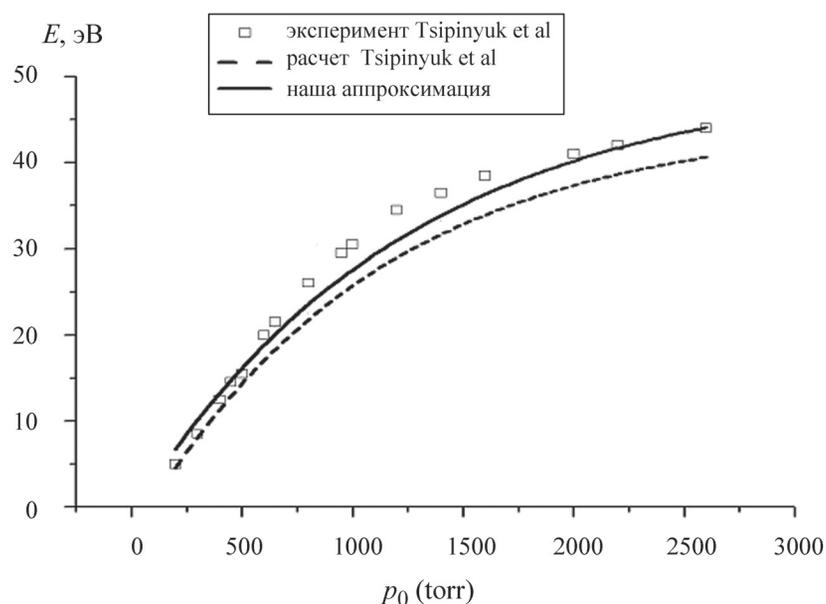


Рис. 2. Зависимость кинетической энергии молекул фуллерена, разогнанных в гелии, от давления торможения при $T_0 = 1705$ К

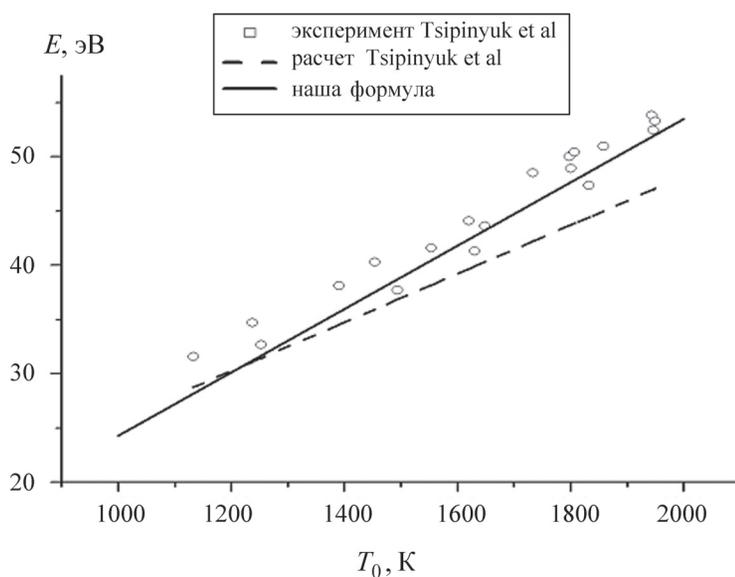


Рис. 3. Зависимость кинетической энергии молекул фуллерена, разогнанных в гелии, от температуры торможения при $p_0 = 62,5\sqrt{T_0}$

торможения T_0 также более удовлетворительно описывается нашей аппроксимацией, чем расчетной зависимостью авторов [3].

Заключение

В работе представлена кинетическая модель аэродинамического ускорения бесструктурных тяжелых частиц, находящихся в примеси к легкому разгоняющему газу-носителю в сверхзвуковой струе. Модель

основана на моментном методе решения уравнения Больцмана с эллипсоидальной функцией распределения по скоростям компонентов смеси. Получена простая аналитическая зависимость предельной средней скорости частиц тяжелого компонента от условий в источнике струи, состава смеси и параметров потенциала перекрестных взаимодействий частиц. Сравнение с данными экспериментальных работ показывает хорошее совпадение.

Приложение
Моменты интеграла столкновений

$$I_{\xi}^i = \sum_{j=1}^N (1 - \delta_{ij}) I_{\xi}^{ij}, I_{v^2}^i = \sum_{j=1}^N (1 - \delta_{ij}) I_{v^2}^{ij}, I_{\rho^2}^i = \sum_{j=1}^N I_{\rho^2}^{ij}, \text{ где} \tag{A.1}$$

$$I_{\xi}^{ij} = 2\mu_j n_j n_j \pi^{-1/2} \frac{\beta_{ij}}{\alpha_{ij}^2} \int_0^{\infty} dz Q_{ij}^{(1)} \left(\frac{z}{\sqrt{\alpha_{ij}}} \right) z^4 \int_{-1}^{+1} dt E(z, t; s_{ij}, \gamma_{ij}),$$

$$I_{v^2}^{ij} = 4\mu_j n_j n_j \pi^{-1/2} \frac{\beta_{ij}}{\alpha_{ij}^{3/2}} \int_0^{\infty} dz Q_{ij}^{(1)} \left(\frac{z}{\sqrt{\alpha_{ij}}} \right) z^4 \int_{-1}^{+1} dt E(z, t; s_{ij}, \gamma_{ij}),$$

$$\left\{ zt^2 \left(\frac{\mu_j}{\alpha_j} - \frac{\mu_i}{\alpha_i} \right) + z\gamma_{ij} (1-t^2) \left(\frac{\mu_j}{\beta_j} - \frac{\mu_i}{\beta_i} \right) + t \left(\frac{v_i}{\alpha_j} + \frac{v_j}{\alpha_i} \right) \right\}, \tag{A.2}$$

$$I_{\rho^2}^{ij} = n_i n_j \pi^{-1/2} \frac{\beta_{ij}}{\alpha_{ij}^{5/2}} \int_0^{\infty} dz z^5 \int_{-1}^{+1} dt E(z, t; s_{ij}, \gamma_{ij}) \left\{ \mu_j^2 Q_{ij}^{(2)} \left(\frac{z}{\sqrt{\alpha_{ij}}} \right) (3t^2 - 1) + \right.$$

$$\left. + 4\mu_j \beta_{ij} \left(\frac{\mu_j}{\beta_j} - \frac{\mu_i}{\beta_i} \right) Q_{ij}^{(1)} \left(\frac{z}{\sqrt{\alpha_{ij}}} \right) (1-t^2) \right\},$$

$$\alpha_i = \frac{m_i}{2kT_{\parallel}^i}, \beta_i = \frac{m_i}{2kT_{\perp}^i}, \alpha_{ij}^{-1} = \alpha_i^{-1} + \alpha_j^{-1}, \beta_{ij}^{-1} = \beta_i^{-1} + \beta_j^{-1},$$

$$v_i = u_i \sqrt{\alpha_{ij}}, s_{ij} = v_j - v_i, \gamma_i = \frac{\beta_i}{\alpha_i},$$

$$\gamma_{ij} = \frac{\beta_{ij}}{\alpha_{ij}}, E(z, t; s_{ij}, \gamma_{ij}) = e^{-(zt-s_{ij})^2 - \gamma_{ij} z^2 (1-t^2)}, \text{ а } \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \text{ - символ Кронекера}$$

Эффективное сечение l -го порядка $Q_{ij}^{(l)}(E_{ij})$ связано с дифференциальным сечением рассеяния $\sigma_{kj}(E_{ij}, \chi)$ соотношением:

$$Q_{kj}^{(l)}(E_{ij}) = 2\pi \int_0^{\pi} \sigma_{kj}(E_{ij}, \chi) (1 - \cos^l \chi) \sin \chi d\chi, \text{ где } \chi - \text{ угол рассеяния.}$$

Выражения для (7) в случае линейного по температурной неравновесности $\gamma_{ij} - 1$ и квадратичного по скольжению скоростей s_{ij} разложения моментов интеграла столкновений имеет следующий вид:

$$F_1^i = t_0^{3/2} \sum_{j=1}^N \mu_j c_j t_{\parallel}^{1/6} \gamma_{ij} (y_j - y_i) \left(1 + \frac{1}{15} s_{ij}^2 \right),$$

$$F_2^i = t_0^{3/2} \sum_{j=1}^N (1 - \delta_{ij}) A_{ij} \left\{ 2\mu_j \left(\frac{m}{M} \right) c_j y_i^{-1} t_{\parallel}^{1/6} \gamma_{ij} \left[(t_{\parallel}^j - t_{\parallel}^i) \left(1 + \frac{11}{5} s_{ij}^2 \right) + 2 \frac{M}{\mu_{ij}} (\mu_i v_i t_{\parallel}^j + \mu_j v_j t_{\parallel}^i) s_{ij} \right] - \right.$$

$$\left. - 4\mu_j c_j t_{\parallel}^{1/6} \gamma_{ij} (y_j - y_i) \left(1 + \frac{1}{15} s_{ij}^2 \right) - \right.$$

$$\left. - \frac{16}{15} \mu_j^2 \left(\frac{m}{\mu_{ij}} \right) c_j y_i^{-1} g_0 t_{\parallel}^{7/6} \gamma_{ij} \left[2s_{ij}^2 + (\gamma_{ij} - 1) - \frac{43}{21} s_{ij}^2 (\gamma_{ij} - 1) \right] \right\} -$$

$$- \frac{8}{15} A_{ii} t_0^{3/2} \left(\frac{m}{m_i} \right) c_i y_i^{-1} g_0 (t_{\parallel}^i)^{7/6} \gamma_i (\gamma_i - 1),$$

$$F_3^i = t_0^{3/2} \sum_{j=1}^N (1 - \delta_{ij}) A_{ij} \left\{ 4\mu_j \left(\frac{m}{M}\right) c_j y_i^{-1} t_{\parallel}^{1/6} \gamma_{ij}^2 (t_{\perp}^j - t_{\perp}^i) \left(1 + \frac{1}{15} s_{ij}^2\right) + \right. \\ \left. + \frac{16}{15} \mu_j^2 \left(\frac{m}{\mu_{ij}}\right) c_j y_i^{-1} g_0 t_{\parallel}^{7/6} \gamma_{ij} \left[2s_{ij}^2 + (\gamma_{ij} - 1) - \frac{43}{21} s_{ij}^2 (\gamma_{ij} - 1) \right] \right\} + \frac{8}{15} A_{ii} t_0^{3/2} \left(\frac{m}{m_i}\right) c_i y_i^{-1} g_0 (t_{\parallel}^i)^{7/6} \gamma_i (\gamma_i - 1),$$

$$\text{где } A_{ij} = \frac{4}{3} \Gamma\left(\frac{8}{3}\right) \frac{p_0 D}{k_B T_0} Q_{ij}^{(1)}(k_B T_0) \sqrt{\frac{2m}{\pi \mu_{ij}}}, t_{\parallel} = \mu_j t_{\parallel}^i + \mu_i t_{\parallel}^j, t_{\perp} = \mu_j t_{\perp}^i + \mu_i t_{\perp}^j,$$

$$\mu_{ij} = \frac{m_i m_j}{M}, \mu_i = \frac{m_i}{M}, M = \sum_i m_i, g_0 = \frac{A_6^{(2)}}{A_6^{(1)}}, \text{ а } \Gamma(x) - \text{ гамма-функция.}$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Atomic and Molecular Methods / Ed. By G. Scoles. N.Y., 1988.
2. Atomic and Molecular Beams. The State of the Art. / Ed. by R. Campargue, Springer. N.Y., 2000.
3. Tsipinyuk B., Budrevich A., Kolodney E. // J. Phys. Chem. 1996. **100**. P. 1475.
4. Wu Y., Toccoi T., Koch N., Iacob E., Pallaoro A., Rudolf P., Iannotta S. // Phys. Rev. Lett. 2007. **98**. P. 076601.
5. Wu Y., Toccoi T., Zhang J., Koch N., Iacob E., Pallaoro A., Iannotta S., Rudolf P. // Appl. Phys. A. Materials Science and Processing. 2009. **95**. P. 21.
6. Tonnezer M., Rigo E., Cottardi S., Bettotti P., Pavesi L., Iannotta S., Toccoi T. // Thin Solid Films. 2011. **519**. P. 4110.
7. Miller D.R., Andres R.P. // Proc. of the 6th Int. Symp. on RGD. 1968. **2**. P. 1385.
8. Schwartz M.H., Andres R.P. // Proc. of the 10th Int. Symp. on RGD. 1976. **2**. P. 135.
9. Raghuraman P., Davidovits P. // Proc. of the 10th Int. Symp. on RGD. 1976. **2**. P. 79.
10. Cattolica R.J., Gallagher R.J., Anderson J.B., Talbot L. // AIAA J. 1979. **17**. P. 341.
11. Longo S., Diomede P.J. // Comput. Phys. 2009. **228**. P. 3851.
12. Riabov V.V. // J. of Thermophysics and Heat Transfer. 2003. **17**. P. 526.
13. Chatwani A.U., Fiebig M. // Proc. of the 12th Int. Symp. on RGD. 1980. **1**. P. 785.
14. Willis D.R., Rept. SAND 78-8216, Sandia Laborat. Albuquerque, New Mexico, 1978.
15. Patch D.F. Ph.D. Diss., University of California, San Diego, 1972.
16. Ленин Л.В. Дис. ... канд. хим. наук. М., 1988.
17. Лазарев А.В., Застенкер Н.Н., Трубников Д.Н. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 2011. **52**. С. 92.
18. Лазарев А.В., Застенкер Н.Н., Трубников Д.Н. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 2011. **52**. С. 16.
19. Ashkenas H., Sherman F.S. // Proc. of the 4th Int. Symp. on RGD. 1966. **2**. P. 84.
20. Raghuraman P., Davidovits P. // Phys. Fluids. 1978. **21**. P. 1485.
21. Aauf N., Anderson J.B., Andres R.P., Fenn J.B., Miller D.R. // Proc. of the 4th Int. Symp. On RGD. 1967. **2**. P. 1317.
22. Miller D.R. // In Atomic and Molecular Beam Methods. Oxford University Press. Oxford. UK. 1988. P. 46.

Поступила в редакцию 25.04.14

ABOUT THE AERODYNAMIC ACCELERATION OF HEAVY PARTICLE IN A SUPERSONIC JET OF DISPARATE MASS BINARY MIXTURE

A.V. Lazarev, K.A. Tatarenko, D.N. Trubnikov

(Division of Physical Chemistry)

On the basis on moment method for solving the Boltzmann equation with an ellipsoidal velocity distribution function, aerodynamic particle acceleration heavy component mixtures in trace amounts in the light carrier gas has been considered. A simple analytical dependence of the limiting average velocity of the particles of the heavy component on conditions in the source and the constant C6 branch attraction interaction potential was obtained. Comparison with experimental data shows good agreement.

Key words: Boltzmann equation, moments method, disparate mass, «slip» velocities

Сведения об авторах: Лазарев Александр Владимирович – вед. науч. сотр. кафедры физической химии химического факультета, канд. физ.-матем. наук (lazer5@yandex.ru); Татарево Кири Алексеевна – науч. сотр. кафедры физической химии химического факультета, канд. хим. наук (kiratatarenko5@yandex.ru); Трубников Дмитрий Николаевич – глав. науч. сотр. кафедры физической химии химического факультета, докт. хим. наук (tdn@phys.chem.msu.ru).