

УДК 333.6.6.011

## НЕРАВНОВЕСНЫЕ ЭФФЕКТЫ В СТАЦИОНАРНОЙ СВЕРХЗВУКОВОЙ СТРУЕ СМЕСИ ОДНОАТОМНЫХ ГАЗОВ

А.В. Лазарев, Н.Н. Застенкер, Д.Н. Трубников

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

**На основе системы моментных уравнений для параметров стационарной сверхзвуковой струи смеси одноатомных газов в гиперзвуковом и сферически-симметричном приближении выполнен анализ неравновесных эффектов – “скольжения” скоростей и разности температур компонентов. Получены зависимости предельных значений “скольжения” скоростей и кинетических температур компонентов смеси от условий в источнике струи и формы потенциала взаимодействия.**

**Ключевые слова:** стационарная сверхзвуковая струя, уравнение Больцмана, “скольжение” скоростей, кинетические температуры компонентов смеси.

Сверхзвуковые струи и сформированные из них молекулярные пучки как инструмент для приготовления вещества в заданном состоянии плодотворно применяются в физико-химическом эксперименте для решения широкого круга задач [1, 2]. При этом используются два уникальных свойства струи: охлаждение вещества в струе ниже температуры конденсации до нескольких градусов Кельвина и получение атомов и молекул с гипертермическими кинетическими энергиями до 10 эВ. За последние годы значительно расширился круг физико-химических экспериментов с использованием сверхзвуковых струй. Сочетание методов лазерной спектроскопии со сверхзвуковыми струями позволяет получить спектры многоатомных молекул высокого разрешения, в том числе биологических объектов [3, 4]. Разработаны методы лабораторного моделирования процессов, протекающих в атмосферах планет и в межзвездном пространстве [5], изучены особенности кинетики реакций при низких температурах [6–8]. Осаждением из сверхзвуковых струй молекул органических полупроводников получают тонкие органические пленки, морфология и структура которых прямо зависят от кинетической энергии падающих на подложку молекул [9–12]. Таким способом были получены органические транзисторы [13] и новый класс газовых сенсоров [14, 15]. В результате неполной конденсации газа в сверхзвуковой струе при определенных условиях образуются атомные и молекулярные кластеры, являющиеся объектами широкой области самостоятельных исследований [16–22]. Успешно развиваются методы получения наноматериалов с использованием сверхзвуковых струй из сверхкритических сред (RESS-процессы) [23–25].

Строгое теоретическое описание физико-химических процессов, протекающих при расширении сверхзвуковых струй, возможно лишь на кинетическом уровне (например, на основе кинетического уравнения Больцмана для смеси). Ранние работы в этой области были посвящены в основном качественному изучению поведения сверхзвуковых струй и поэтому в них использовались либо простые модели взаимодействия частиц (максвелловские молекулы [26, 27], твердые сферы [28, 29]), либо модельные аналоги уравнения Больцмана [30, 31], что существенно упрощало математический аппарат.

Применение моментных методов решения уравнения Больцмана [32] дает возможность построения модели струи для реалистического потенциала взаимодействия. Так, в различных приближениях моментного метода Грэда изучалась релаксация поступательной энергии в стационарных и импульсных сверхзвуковых струях одноатомных газов [33, 34] и их смесей [35, 36]. На основе эллипсоидальной функции распределения изучалась релаксация поступательной энергии в стационарных струях одноатомных газов [37–39], их смесей [40] и релаксация вращательной энергии в струях двухатомных газов [41–43]. В рамках такого подхода разработан метод определения постоянной  $C_6$  потенциала взаимодействия в экспериментах со сверхзвуковыми импульсными струями одноатомных газов и неполярных молекул [44, 45].

В работе [46], используя систему кинетических уравнений Больцмана, были получены уравнения поступательной релаксации в сверхзвуковой стационарной струе смеси одноатомных газов, учитывающие двумерность течения. В настоящей работе в гипер-

звуковом приближении рассматриваются такие неравновесные эффекты, как “скольжение” скоростей (разность средних скоростей компонентов смеси) и разность температур компонентов, являющиеся основой процессов разделения, разгонки и охлаждения компонентов смеси при расширении струй.

**Основные уравнения в гиперзвуковом приближении**

При выводе уравнений для средней скорости и кинетической температуры в качестве исходной использовалась система моментных уравнений, приведенная в работе [46]. Будем предполагать при этом, что давление в источнике достаточно велико и поток можно считать сферически-симметричным. Тогда указанная система уравнений замыкается уравнением неразрывности для сферически-симметричного течения  $\rho r^2 = \text{const}$  и принимает вид:

$$\begin{aligned} (1 - \frac{R_\alpha T_{\alpha\parallel}}{u_\alpha^2}) \frac{du_\alpha^2}{dr} + 2 \frac{d}{dr} (R_\alpha T_{\alpha\parallel}) - \frac{4R_\alpha T_{\alpha\perp}}{r} &= \frac{2I_\alpha^\xi}{n_\alpha}, \\ \frac{d}{dr} (u_\alpha^2 + 3R_\alpha T_{\alpha\parallel} + 2R_\alpha T_{\alpha\perp}) &= \frac{I_\alpha^{v^2}}{n_\alpha u_\alpha}, \\ \frac{d}{dr} (R_\alpha T_{\alpha\perp}) + \frac{2R_\alpha T_{\alpha\perp}}{r} &= \frac{1}{2} \frac{I_\alpha^{p^2}}{n_\alpha u_\alpha}. \end{aligned} \tag{1}$$

Здесь  $n_\alpha$ ,  $u_\alpha$ ,  $T_{\alpha\parallel}$ ,  $T_{\alpha\perp}$  – числовая плотность, средняя скорость, параллельная и перпендикулярная температуры компонента  $\alpha$ ;  $R_\alpha = k/m_\alpha$  – газовая постоянная,  $k$  – постоянная Больцмана,  $m_\alpha$  – масса частицы сорта  $\alpha$ ;  $r$  – расстояние от среза сопла вдоль оси течения;  $I_\alpha^\xi$ ,  $I_\alpha^{v^2}$  и  $I_\alpha^{p^2}$  – моменты интегралов столкновений [46]. В гиперзвуковом приближении, т.е. при предположении, что тепловая скорость газа много меньше скорости струи, в первом уравнении системы (1) можно пренебречь членом  $R_\alpha T_{\alpha\parallel}/u_\alpha^2$ .

Введем безразмерные переменные  $x = r/d$ ,  $y_\alpha = u_\alpha \sqrt{\bar{m}/kT_0}$ ,  $t_{\alpha\parallel,\perp} = T_{\alpha\parallel,\perp}/T_0$ , где  $d$  – диаметр сопла,  $T_0$  – температура в сопловой камере,  $\bar{m} = \sum_\alpha m_\alpha c_\alpha$  – средняя масса смеси,  $c_\alpha$  – мольная доля частиц компонента  $\alpha$ . После несложных преобразований в гиперзвуковом приближении из (1) получаем:

$$\begin{aligned} y_\alpha \frac{dy_\alpha}{dx} &= -\frac{\bar{m}}{m_\alpha} \left( \frac{dt_{\alpha\parallel}}{dx} - \frac{2t_{\alpha\perp}}{x} \right) + F_\alpha^{(1)}, \\ \frac{dt_{\alpha\parallel}}{dx} &= \frac{m_\alpha}{\bar{m}} F_\alpha^{(2)}, \end{aligned}$$

$$\frac{dt_{\alpha\perp}}{dx} = -\frac{2t_{\alpha\perp}}{x} + \frac{1}{2} \frac{m_\alpha}{\bar{m}} F_\alpha^{(3)}, \tag{2}$$

где

$$\begin{aligned} F_\alpha^{(1)} &= \frac{\bar{m}}{kT_0} d \frac{I_\alpha^\xi}{n_\alpha}, \\ F_\alpha^{(2)} &= \left( \frac{\bar{m}}{kT_0} \right)^{3/2} d \frac{I_\alpha^{v^2} - 2u_\alpha I_\alpha^\xi - I_\alpha^{p^2}}{n_\alpha y_\alpha}, \\ F_\alpha^{(3)} &= \left( \frac{\bar{m}}{kT_0} \right)^{3/2} d \frac{I_\alpha^{p^2}}{n_\alpha y_\alpha}. \end{aligned} \tag{3}$$

Эта замкнутая система уравнений в общем случае интегрируется только численно. Однако при некоторых предположениях уравнения для средних скоростей и кинетических температур компонентов могут быть “расцеплены”.

При увеличении давления  $p_0$  в сопловой камере величины плотности, средней скорости и температуры компонентов стремятся к своим изэнтропическим значениям [47]:

$$\begin{aligned} \frac{T}{T_0} = t_0 &= \left( 1 + \frac{1}{3} M^2 \right)^{-1}, \\ \frac{n}{n_0} &= t_0^{3/2}, \\ \frac{u}{u_\infty} &= \left( 1 - \frac{T}{T_0} \right)^{1/2}, \end{aligned} \tag{4}$$

где  $u_\infty = \sqrt{5kT_0/\bar{m}}$ . Для зависимости числа Маха  $M$  от расстояния будем использовать эмпирическое соотношение Ашкеназа и Шермана [48]:

$$M(x) = y - \frac{2}{y} + \frac{10,75}{y^3}, \quad x \geq 1,$$

где  $y = 3,26(x - 0,075)^{2/3}$ . Тогда легко показать, что на больших расстояниях от источника ( $x \rightarrow \infty$ ) получается следующее асимптотическое поведение для параметров (4):

$$\begin{aligned} M &= 3,26x^{2/3} \rightarrow \infty, \\ t_0 &= bx^{-4/3} \rightarrow 0 \quad (b = 0,2823), \\ u &= u_\infty(1 - 0,141 x^{-4/3}) \rightarrow u_\infty. \end{aligned} \tag{5}$$

Учитывая это, заменим в правых частях (2) температуры компонентов на  $t_0$ , а скорости – на  $u_\infty$ . Кроме того, будем считать, что в гиперзвуковом приближении для интегралов столкновений справедливо линейное приближение по величине “скольжения” скоростей, а плотности компонентов меняются по закону

$$n_0 = c_\alpha n = c_\alpha n_0 t_0^{3/2}.$$

В результате для частиц, рассеивающихся на потенциале

$$V(z) = - C_6/z^6, \tag{6}$$

получаем системы уравнений для средних скоростей:

$$y_\alpha \frac{dy_\alpha}{dx} = - \frac{\bar{m}}{m_\alpha} x^2 \frac{d}{dx} \left( \frac{t_0}{x^2} \right) + A \mu_\beta c_\beta t_0^{5/3} (y_\beta - y_\alpha) \tag{7}$$

и для кинетических температур:

$$\begin{aligned} \frac{dt_{\alpha\parallel}}{dx} = & Ay_\infty^{-1} t_0^{3/2} [2\mu_\alpha \mu_\beta c_\beta \gamma_0 t_{\parallel}^{1/6} (t_{\beta\parallel} - t_{\alpha\parallel}) - \\ & - \frac{3}{2} \mu_\beta c_\beta g_0 \gamma_0 t_{\parallel}^{7/6} \varphi(\gamma_0) - \\ & - \frac{3}{4} c_\alpha g_{\alpha\beta} \gamma_\alpha t_{\alpha\parallel}^{7/6} \varphi(\gamma_\alpha)], \end{aligned} \tag{8}$$

$$\begin{aligned} \frac{dt_{\alpha\perp}}{dx} = & - \frac{2t_{\alpha\perp}}{x} + \frac{1}{2} Ay_\infty^{-1} t_0^{3/2} [4\mu_\alpha \mu_\beta c_\beta \gamma_0^2 t_{\parallel}^{1/6} (t_{\beta\perp} - t_{\alpha\perp}) + \\ & + \frac{3}{2} \mu_\beta c_\beta g_0 \gamma_0 t_{\parallel}^{7/6} \varphi(\gamma_0) + \frac{3}{4} c_\alpha g_{\alpha\beta} \gamma_\alpha t_{\alpha\parallel}^{7/6} \varphi(\gamma_\alpha)], \end{aligned}$$

$$A = \frac{4}{3} \Gamma\left(\frac{8}{3}\right) \frac{p_0 d}{kT_0} Q_6^{(1)}(kT_0) \sqrt{\frac{2\bar{m}}{\pi\mu}},$$

$$\mu = \frac{m_\alpha m_\beta}{M_0}, \quad M_0 = \sum_\alpha m_\alpha,$$

где  $\Gamma(x)$  – гамма-функция,  $Q_6^{(l)}(E)$  – эффективное сечение  $l$ -го порядка, которое в случае потенциала (6) имеет следующий вид [49]:

$$Q_6^{(l)}(E) = 2\pi(6C_6/E)^{1/3} A_6^{(l)}$$

$$(A_6^{(1)} = 0,4341, A_6^{(2)} = 0,3274).$$

Кроме того,

$$t_{\parallel} = \mu_\beta t_{\alpha\parallel} + \mu_\alpha t_{\beta\parallel}, \quad t_{\perp} = \mu_\beta t_{\alpha\perp} + \mu_\alpha t_{\beta\perp}, \quad \gamma_0 = t_{\parallel} / t_{\perp},$$

$$\gamma_\alpha = t_{\alpha\parallel} / t_{\alpha\perp}, \quad y_\infty = \sqrt{5}, \quad g_0 = A_6^{(2)} / A_6^{(1)},$$

$$g_{\alpha\beta} = g_0 (C_{6\alpha\alpha} / C_{6\alpha\beta}) \sqrt{2\mu_\beta}, \quad \mu_\alpha = m_\alpha / M_0.$$

В рассматриваемом приближении моменты интегралов столкновений, описывающие диффузионный перенос импульса  $I_\alpha^\xi$  и энергии  $I_\alpha^{v^2}$ , приобретают аналитический вид, а интегралы, описывающие вязкостный перенос энергии, сводятся к однократным интегралам:

$$\varphi(\gamma) = \int_0^1 \frac{3t^2 - 1}{[\gamma - t^2(\gamma - 1)]^{8/3}} dt$$

со следующими свойствами:

$$\varphi(\gamma \rightarrow 1) \cong \frac{32}{45}(\gamma - 1) \quad (\text{равновесный предел}),$$

$$\varphi(\gamma \rightarrow \infty) \cong \frac{3}{5\gamma} \quad (\text{неравновесный предел}).$$

Параметр  $\gamma = T_{\parallel}/T_{\perp}$  характеризует анизотропию функции распределения в пространстве скоростей и уже использовался для этой цели в работе [50], где назывался параметром неравновесности.

### “Скольжение” скоростей

Уравнение для “скольжения” скоростей в бинарной смеси получается, если вычесть из уравнения (7) для одного компонента уравнение для другого компонента. При этом множители  $y_\alpha$  заменяются на предельное значение  $y_\infty$ . Тогда, полагая, согласно (5),

$$t_0 = bx^{-4/3},$$

получим:

$$\frac{d\Delta}{dx} = a_1 x^{-7/3} - a_2 x^{-20/9} \Delta,$$

где

$$\Delta = y_\alpha - y_\beta, \quad a_1 = \frac{10b}{3y_\infty} \bar{m} \left( \frac{1}{m_\alpha} - \frac{1}{m_\beta} \right), \quad a_2 = \frac{A}{y_\infty} \frac{\bar{m}}{M_0} b^{5/3}.$$

Проведя перемасштабирование переменных следующим образом

$$x = a_2^{9/11} t, \quad \Delta = a_1 a_2^{-12/11} \delta,$$

в новых переменных получаем

$$\frac{d\delta}{dt} = t^{-7/3} - t^{-20/9} \delta.$$

Нетрудно показать, что при  $A \rightarrow \infty$  ( $p_0 \rightarrow \infty$ ) предельное (при  $t \rightarrow \infty$ ) решение этого уравнения будет следующим

$$\delta_\infty = \left(\frac{11}{9}\right)^{1/11} \Gamma\left(\frac{12}{11}\right) = 0,973.$$

Тогда предельное “скольжение” скоростей будет иметь вид:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta u_\infty}{u_\infty} = & \frac{u_{\alpha\infty} - u_{\beta\infty}}{u_\infty} = \\ = & \text{const}(\mu_\beta - \mu_\alpha)(\mu_\alpha c_\alpha + \\ & + \mu_\beta c_\beta)^{-7/11} (\mu_\alpha \mu_\beta)^{-5/11} \left(\frac{p_0 d}{kT_0}\right)^{-12/11} \left(\frac{C_{6\alpha\beta}}{kT_0}\right)^{-4/11}. \end{aligned} \tag{9}$$

Здесь константа равна 1,025 и имеет универсальный характер, т.е. не зависит ни от состава смеси, ни от

масс компонентов, ни от условий в источнике. На основе (9) можно сделать следующие выводы: “скольжение” скоростей увеличивается при увеличении отношения масс компонентов, при увеличении доли легкого компонента, при уменьшении давления в источнике и увеличении температуры, а также при уменьшении сечения рассеяния частиц разного сорта. С физической точки зрения это объясняется уменьшением эффективной частоты столкновений частиц разного сорта.

Интересно сравнить формулу (9) с часто используемым выражением для  $\Delta u_\infty / u_\infty$ , предложенным в [51, 52] на основе размерностных соображений. На рис. 1 приведены результаты расчета зависимости

$$\frac{u_{Xe\infty}}{u_{He\infty}} = \sqrt{\frac{m_{He}}{\bar{m}}} \left(1 - \frac{m_{He} C_{He}}{\bar{m}} \frac{\Delta u_\infty}{u_\infty}\right)$$

от величины давления  $p_0$  с использованием выражения для  $\Delta u_\infty / u_\infty$ , полученного в работе [52] и даваемого формулой (9), для смеси Хе (0,01)–Не (0,99) ( $C_{He-Xe} = 3,48 \times 10^{-59}$  эрг·см<sup>6</sup> [52]) при  $T_0 = 298$  К и  $d = 0,038$  см, что соответствует условиям проведения эксперимента [53], результаты которого также представлены на рис. 1. Из рисунка видно, что обе зависимости удовлетворительно (с ошибкой не более 5%) совпадают друг с другом и опи-

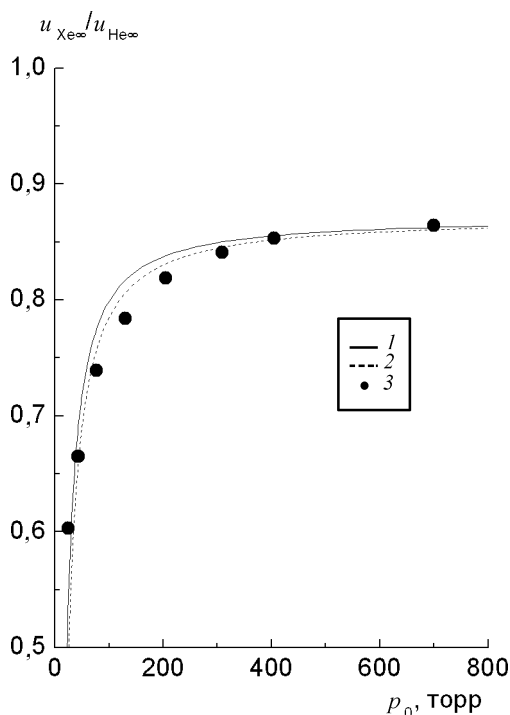


Рис. 1. Отношения предельных скоростей ксенона и гелия в смеси Хе(0,01)–Не(0,99) при  $T_0 = 298$  К в зависимости от давления в сопловой камере: 1 – формула (9), 2 – формула работы [52], 3 – эксперимент [53]

сывают экспериментальные результаты при давлениях  $p_0$  выше 40 торр. Совпадение несколько ухудшается при  $p_0 < 40$  торр, что можно объяснить неадекватностью этих моделей при низких значениях давления.

### Кинетические температуры компонентов

Перемасштабируем переменные ( $t_{\alpha||\perp} = b_1 z_{\alpha||\perp}$ ,  $x = b_2 t$ ) в системе уравнений (8) таким образом, чтобы, во-первых, обратился в единицу постоянный множитель перед интегралом столкновения (выражение в квадратных скобках) и, во-вторых, чтобы граничные условия в ближней области носили универсальный характер:  $z_{\alpha||\perp} \rightarrow t^{-4/3}$  при  $t \rightarrow 0$ . Тогда для  $b_1$  и  $b_2$  получаем:

$$b_1 = [Ab^{5/3} / y_\infty]^{-12/11} b,$$

$$b_2 = [Ab^{5/3} / y_\infty]^{9/11},$$

а система уравнений (8) преобразуется к виду:

$$\begin{aligned} \frac{dz_{\alpha||}}{dt} &= t^{-2} [f_\alpha^{(1)} \gamma_0 z_{||}^{1/6} (z_{\beta||} - z_{\alpha||}) - \\ &- f_\alpha^{(2)} \gamma_0 z_{||}^{7/6} \varphi(\gamma_0) - f_\alpha^{(3)} \gamma_\alpha z_{\alpha||}^{7/6} \varphi(\gamma_\alpha)], \\ \frac{dz_{\alpha\perp}}{dt} &= -\frac{2z_{\alpha\perp}}{t} + \frac{1}{2} t^{-2} [2f_\alpha^{(1)} \gamma_0^2 z_{||}^{1/6} (z_{\beta\perp} - z_{\alpha\perp}) + \\ &+ f_\alpha^{(2)} \gamma_0 z_{||}^{7/6} \varphi(\gamma_0) + f_\alpha^{(3)} \gamma_\alpha z_{\alpha||}^{7/6} \varphi(\gamma_\alpha)], \end{aligned} \quad (10)$$

где

$$f_\alpha^{(1)} = 2\mu_\alpha \mu_\beta c_\beta, \quad f_\alpha^{(2)} = \frac{3}{2} \mu_\beta c_\beta g_0, \quad f_\alpha^{(3)} = \frac{3}{4} c_\alpha g_{\alpha\beta}.$$

Система уравнений (10) универсальна для смеси данного состава, так как ни ее коэффициенты, ни граничные условия не зависят от давления и температуры в источнике. Однако решение этой системы зависит от безразмерных параметров  $\mu_\alpha$ ,  $c_\alpha$ ,  $C_{6\alpha\alpha}/C_{6\alpha\beta}$ , а значит, специфично для каждой конкретной смеси.

Численное решение системы (10) позволяет получить предельные значения кинетических температур

$$t_{\alpha||\infty} = (Ab^{5/3} / y_\infty)^{-12/11} b z_{\alpha||\infty}, \quad (11)$$

где  $z_{\alpha||\infty}$  – функция безразмерных параметров  $m_\alpha/m_\beta$ ,  $c_\alpha$ ,  $C_{6\alpha\alpha}/C_{6\alpha\beta}$ ,  $C_{6\beta\beta}/C_{6\alpha\beta}$ . В случае однокомпонентной струи можно показать, что предельная температура зависит только от величины  $n_0 d(Q_{\alpha\alpha}^{(2)})_0$ . Численное решение системы (10) при  $c_\beta = 0$  дает

$$t_{\alpha||\infty} (c_\alpha = 1) = 6,16 [n_0 d(Q_{\alpha\alpha}^{(2)})_0]^{-12/11}, \quad (12)$$

где

$$(Q_{\alpha\alpha}^{(2)})_0 = 2\pi A_6^{(2)} \left( \frac{6C_{6\alpha\alpha}}{kT_0} \right)^{1/3}.$$

Отношение

$$\frac{t_{\alpha\parallel}}{t_{\alpha\parallel}(c_\alpha = 1)} = \left( \frac{m_\alpha}{\bar{m}} \right)^{12/11} \frac{z_{\alpha\parallel}}{z_{\alpha\parallel}(c_\alpha = 1)}$$

также универсально для смеси данного состава. На рис. 2–5 приведены зависимости

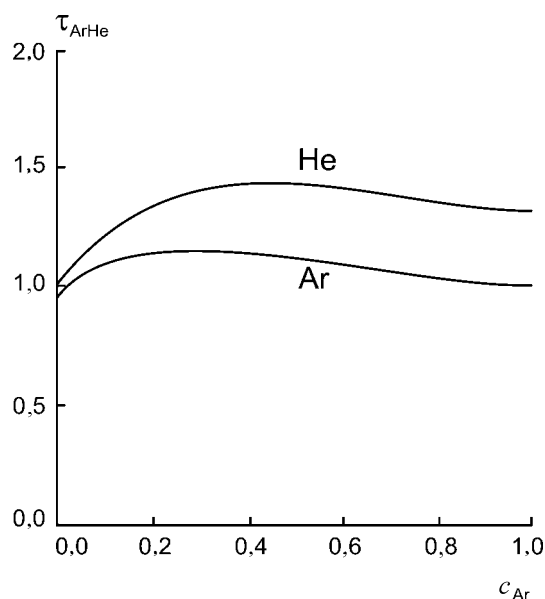


Рис. 2. Зависимость  $\tau_{ArHe}$  от состава для смеси аргон–гелий

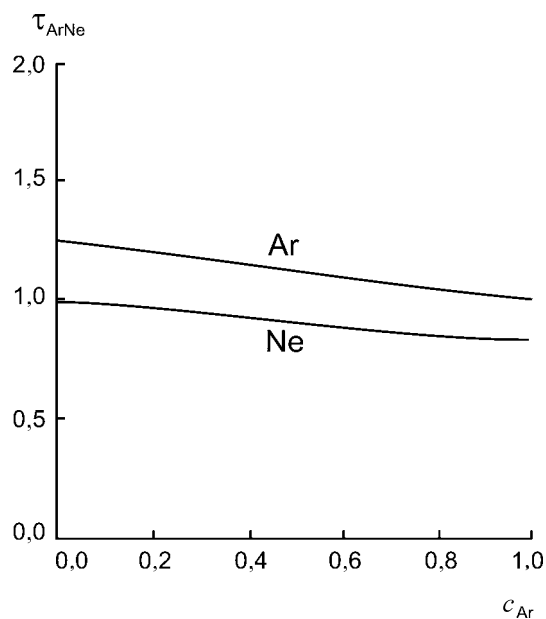


Рис. 3. Зависимость  $\tau_{ArNe}$  от состава для смеси аргон–неон

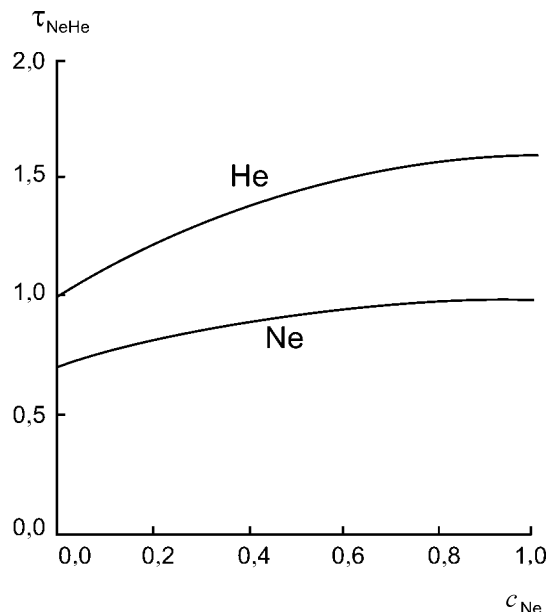


Рис. 4. Зависимость  $\tau_{NeHe}$  от состава для смеси неон–гелий

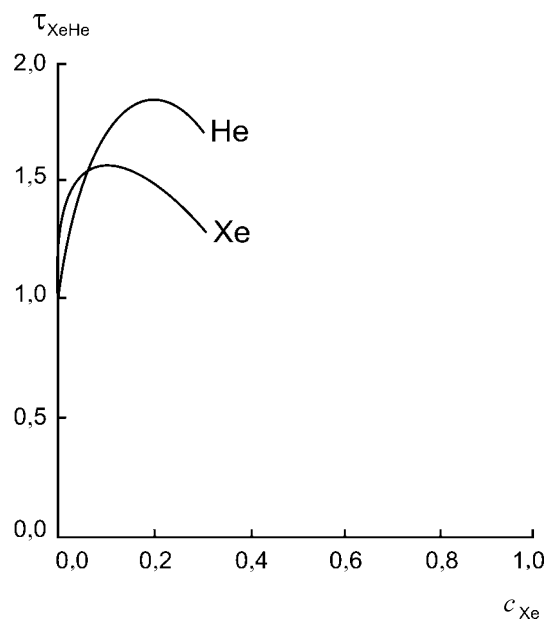


Рис. 5. Зависимость  $\tau_{XeHe}$  от состава для смеси ксенон–гелий

$$\tau_{\alpha\beta} = [t_{\alpha\parallel\infty}(c_\alpha) / t_{\alpha\parallel\infty}(c_\alpha = 1)] (\bar{m} / m_\alpha)^{12/11}$$

от состава для некоторых смесей инертных газов. Предельная температура  $\alpha$ -го компонента в гиперзвуковом приближении определяется следующим образом: зная  $c_\alpha$ , по соответствующей графической зависимости находим  $\tau_{\alpha\beta}(c_\alpha)$ ; пользуясь выражением (12), рассчитываем безразмерную температуру в однокомпонентной струе  $\alpha$ -го компонента при тех же условиях в источнике. Тогда

$$T_{\alpha||\infty}(c_{\alpha}) = T_0 t_{\alpha||\infty}(c_{\alpha} = 1) \left(\frac{m_{\alpha}}{m}\right)^{12/11} \tau_{\alpha\beta}(c_{\alpha}).$$

Численное решение системы уравнений (10) показывает, что температура тяжелого компонента всегда выше температуры легкого компонента (если размеры частиц сравнимы по величине). Это объясняется тем, что полное число столкновений для частиц разной массы примерно одинаково, но для легких частиц при релаксации эффективны все столкновения, а для тяжелых – столкновения с легкими частицами менее эффективны. Это приводит к уменьшению скорости релаксации, а значит, к большему отклонению от изэнтропической температуры.

Отметим, что при уменьшении эффективного числа Кнудсена предельные значения “скольжения” скоростей и кинетических температур ведут себя, согласно (9) и (11), по одному и тому же закону  $A^{-12/11}$ . Следовательно, пики функций распределения частиц

по скоростям разных компонентов сближаются со скоростью  $\sim A^{-12/11}$  и сужаются со скоростью  $\sim A^{-6/11}$ , т.е. при увеличении давления или уменьшении температуры в источнике разрешение пиков функций распределения разных компонентов смеси уменьшается. Этот вывод имеет прямое отношение к теории метода разделения смесей (и изотопов в том числе), основанного на эффекте “скольжения” скоростей.

Таким образом, в настоящей работе на основе полученных в [46] моментных уравнений для параметров сверхзвуковой стационарной струи смеси одноатомных газов выполнен анализ неравновесных явлений – “скольжения” скоростей и разности температур в гиперзвуковом приближении. Полученная аналитическая зависимость “скольжения” скоростей от условий в источнике струи и параметра  $C_6$  потенциала взаимодействия частиц может служить основой метода экспериментального определения этого параметра.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 08–03–12072–офи).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Atomic and Molecular Beam Methods / Ed. G. Scoles. N.Y., 1988.
2. Atomic and Molecular Beams: the State of the Art 2000 / Ed. R. Campargue, N.Y., 2001.
3. Kang C., Pratt D.W. // Int. Rev. Phys. Chem. 2005. **24**. N 1. P. 1.
4. Schlag E.W. ZEKE Spectroscopy. Cambridge. N.Y., 1998.
5. Smith I.W.M. // Chem. Rev. 2003. **103**. P. 4549.
6. Smith I.W.M. // Angew. Chem. Int. Ed. 2009. **45**. P. 2842.
7. Smith I.W.M., Sage A.M., Donahue N.M., Herbst E., Quan D. // Faraday Discuss. 2006. **133**. P. 137.
8. Taylor S.F., Goddard A., Blitz M.A., Cleary P.A., Heard D.E. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2008. **10**. P. 422.
9. Wu Y., Toccoli T., Zhang J., Koch N., Jacob E., Pallaoro A., Iannotta S., Rudolf P. // Appl. Phys. A. Materials Science & Processing. 2009. **95**. P. 21.
10. Toccoli T., Tonzzer M., Bettotti P., Coppede N., Larcheri S., Pallaoro A., Pavesi L., Iannotta S. // Organic Electronics. 2009. **10**. P. 521.
11. Coppede N., Toccoli T., Pallaoro A., Siviero F., Walzer K., Castriota M., Cazzanelli E., Iannotta S. // J. Chem. Phys. A. 2007. **111**. P. 12550.
12. Goose J.E., Killampalli A., Clancy P., Engstrom J.R. // J. Phys. Chem. C. 2009. **113**. P. 6068.
13. Papadimitratos A., Amassian A., Killampalli A.S., Mack J.L., Malliaras G.G., Engstrom J.R. // Appl. Phys. A. Materials Science & Processing. 2009. **95**. P. 29.
14. Siviero F., Coppede N., Pallaoro A., Taurino A.M., Toccoli T., Siciliano P., Iannotta S. // Sensors and Actuators B. 2007. **126**. P. 214.
15. Siviero F., Coppede N., Taurino A.M., Toccoli T., Siciliano P., Iannotta S. // Sensors and Actuators B. 2008. **130**. P. 405.
16. Johnston R.L. Atomic and Molecular Clusters. L.; N. Y., 2002.
17. Berry R.S., Smirnov B.M. Phase Transitions of Simple Systems. Heidelberg, 2008.
18. Бери Р.С., Смирнов Б.М. // Усп. физ. наук. 2009. **179**. № 2. С. 147.
19. Castleman A.W., Khanna S.N. // J. Phys. Chem. C. 2009. **113**. P. 2664.
20. Toennies J.P., Vilesov A.F. // Angew. Chem. Int. Ed. 2004. **43**. P. 2622.
21. Dermota T.E., Zhong Q., Castleman A.W. // Chem Rev. 2004. **104**. P. 1861.
22. Крайнов В.П., Смирнов Б.М., Смирнов М.Б. // Усп. физ. наук. 2007. **177**. № 9. С. 953.
23. Weber M., Thies M. Supercritical fluid technology in materials science and engineering / Ed. M. Dekker. N.Y., 2002. P. 387.
24. Reverchon E., Adami R. // J. of Supercritical Fluids. 2006. **37**. P. 1.
25. Dea S., Miller D.R., Continetti R.E. // J. Phys. Chem. A. 2009. **113**. P. 388.
26. Cooper A.L., Bienkowski J.K. Proc. 5th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. N. Y., 1967. V. 1. P. 861.
27. Nanbu K. // Phys. Fluids. 1979. **22**. N 5. P. 998.
28. Anderson J.B. // Entropie. 1967. N 18. P. 33.
29. Raghuraman P., Davidovits P. // Phys. Fluids. 1978. **21**. N 9. P. 1485.
30. Hamel B.B., Willis D.R. // Phys. Fluids. 1966. **9**. N 5. P. 829.
31. Willis D.R., Hamel B.B. Proc. 5th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. N. Y., 1967. V. 1. P. 837.
32. Жданов В.М. Процессы переноса в многокомпонентной плазме. М., 2009.
33. Кулезнев Е.В., Лазарев А.В., Трубников Д.Н. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 1987. **28**. С. 117.
34. Лазарев А.В., Застенкер Н.Н., Трубников Д.Н., Татаренко К.А., Прибытков А.В. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 2006. **47**. С. 377.
35. Ленин Л.В., Лазарев А.В., Трубников Д.Н. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 1987. **28**. С. 347.

36. Лазарев А.В., Застенкер Н.Н., Трубников Д.Н., Татаренко К.А., Прибытков А.В. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 2007. **48**. С. 235.
37. Othmer P.W., Knuth E.L. Proc. 13th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. N. Y., 1985. V. 2. P. 733.
38. Toennies J.P., Winkelmann K. // J.Chem.Phys. 1977. **66**. N 9. P. 3965.
39. Лазарев А.В., Застенкер Н.Н., Трубников Д.Н. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 2003. **44**. С. 238.
40. Takahashi N., Moriya T., Teshima K. Proc. 13th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. N. Y., 1985. V. 2. P. 939.
41. Randenija L.K., Smith M.A. // J.Chem.Phys. 1990. **93**. N 1. P. 661.
42. Лазарев А.В., Жданов В.М., Застенкер Н.Н., Трубников Д.Н. // ПМТФ. 1997. **38**. № 5. С. 65.
43. Лазарев А.В., Застенкер Н.Н., Трубников Д.Н. // Хим. физика. 2003. **22**. № 1. С. 10.
44. Лазарев А.В., Застенкер Н.Н., Трубников Д.Н., Татаренко К.А., Прибытков А.В. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 2008. **49**. С. 226.
45. Татаренко К.А., Лазарев А.В., Трубников Д.Н., Застенкер Н.Н. // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2008. **6**. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2008-11-12-001.pdf>.
46. Лазарев А.В., Застенкер Н.Н., Трубников Д.Н. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 2011. **52**. С. 16.
47. Липманн Г., Рошко А. Элементы газовой динамики. М., 1960. С. 121.
48. Ashkenas Y., Sherman S.F. Proc. 4th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. N. Y., 1966. V. 2. P. 84.
49. Кулезнев Е.В., Лазарев А.В., Трубников Д.Н. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 1988. **29**. С. 157.
50. Willis D.R., Hamel B.B., Lin G.T. // Phys. Fluids. 1972. **15**. N 4. P. 573.
51. Miller D.R., Andres R.P. Proc. 6th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. N. Y., 1969. V. 2. P. 1385.
52. Miller D.R. Atomic and Molecular Beam Methods / Ed. G. Scoles. N. Y., 1988. V. 1. P. 14.
53. Abuaf N., Anderson J.B., Andres R.P., Fenn J.B., Miller D.R. Proc. 5th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. N. Y., 1967. V. 2. P. 1317.

Поступила в редакцию 20.06.10

## NON-EQUILIBRIUM EFFECTS IN STEADY-STATE SUPERSONIC JET OF A MIXTURE OF MONOATOMIC GASES

A.V. Lazarev, N.N. Zastenker, D.N. Trubnikov

(Division of Physical Chemistry)

**On the basis of the moment equation system for parameters of a steady supersonic jet of a mixture of monoatomic gases, the analysis of nonequilibrium effects as a velocity slip and temperature difference of components has been carried out in hypersonic and spherically symmetric approximations. The limiting values of velocity slips and kinetic temperatures of mixture components depending on the source jet conditions and interaction potential were obtained.**

**Key words:** *steady supersonic jet, Boltzmann equation, Grad moment method, translational relaxation.*

**Сведения об авторах:** Лазарев Александр Владимирович – вед. науч. сотр. кафедры физической химии химического факультета МГУ, канд. физ.-матем. наук (lazarev@phys.chem.msu.ru); Застенкер Нина Николаевна – ст. науч. сотр. кафедры физической химии химического факультета МГУ, канд. хим. наук (zastenker@mtu-net.ru); Трубников Дмитрий Николаевич – глав. науч. сотр. кафедры физической химии химического факультета МГУ, докт. хим. наук, профессор (tdn@phys.chem.msu.ru).