

УДК 333.6.6.011

КИНЕТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ИМПУЛЬСНОЙ СВЕРХЗВУКОВОЙ СТРУИ, ИСТЕКАЮЩЕЙ В ВАКУУМ. III. МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ПОТЕНЦИАЛА МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

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

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

Предложен новый метод определения параметров потенциала межатомного взаимодействия на основе кинетического описания импульсной сверхзвуковой струи. Получены аналитические соотношения, связывающие положение максимума экспериментального времяпролетного спектра с условиями в источнике струи и параметрами потенциала взаимодействия.

Сверхзвуковые импульсные струи и молекулярные пучки применяются в разных областях физики и химии, в частности широко используются такие свойства струй, как глубокое охлаждение по поступательным и внутренним степеням свободы. Последнее позволяет определять кинетические коэффициенты газа при низких температурах вплоть до 1 К.

В работах [1–5] был развит метод определения потенциала межатомного взаимодействия из экспериментальных зависимостей параметров стационарной сверхзвуковой струи (кинетическая температура, “скольжение” скоростей) от условий в источнике струи (давление, температура, размер сопла, состав газа). Применение этого метода к чистым инертным газам и их смесям подробно описано в [6]. При этом для определения параметров молекулярного пучка используется времяпролетная методика, позволяющая получить времяпролетный спектр, восстановить из него функцию распределения и получить соответственно все интересующие нас моменты функции распределения – плотность, среднюю скорость и температуру. Подобным образом можно поступить и в случае импульсных сверхзвуковых струй, экспериментальные установки с которыми на один–два порядка дешевле и компактнее установок со стационарными струями. Однако процедура восстановления функции распределения из времяпролетного спектра требует решения интегрального уравнения типа свертки, что является некорректной задачей [7], т.е. даже малый шум в спектре может дать большую ошибку в восстанавливаемой функции. Имеющиеся многочисленные регулирующие алгоритмы требуют точного знания аппаратной функции, что в большинстве случаев невозможно, и удовлетворительная точность достига-

ется только при большом искажении реальной функции распределения [8].

В настоящей статье предложены основы метода определения параметров потенциала межатомного взаимодействия, исходя из результатов работ по кинетическому описанию сверхзвуковых импульсных струй [9, 10]. По этому методу из времяпролетного спектра, а именно зависимости мгновенной плотности частиц от времени, можно получать параметры потенциала межатомного взаимодействия.

Основные соотношения метода

Для вывода основных соотношений использовали следующую математическую модель времяпролетного эксперимента: в момент закрытия импульсного клапана ($t = 0$) сформированный пакет газа начинает перемещаться по направлению к детектору и проходит времяпролетную базу длиной L_0 – расстояние от точки r_s [9] до детектора. Детектор вырезает из газового пакета цилиндр с основанием y_0 (y_0 – диаметр входного отверстия детектора) и регистрирует усредненную по площади входного отверстия мгновенную плотность $N_\alpha(t)$ частиц сорта α . В момент времени t :

$$N_\alpha(t) = 2y_0^{-2} \int_0^{y_0} n_\alpha(\vec{r}, t) y dy, \quad (1)$$

где $r = [(L_0 - u_{\text{пр}}t)^2]^{1/2}$, а $n_\alpha(\vec{r}, t)$ и $u_{\text{пр}}$ определены в работах [9, 10].

Экспериментально с хорошей точностью можно установить положение максимума времяпролетного спектра $t_{\alpha\alpha}^{\text{макс}}$ α -го компонента смеси. Выражение для

$t_{\alpha\alpha}^{\text{макс}}$ получено из уравнения $dN_{\alpha}(t)/dt = 0$. Для однокомпонентного пучка, используя выражения для $n_{\alpha}(\vec{r}, t)$ {см. (9) и (10) в [9]}, несложно получить:

$$t_{\alpha\alpha}^{\text{макс}} - A = (p_0^0)^{\frac{2n}{3n-4}} C_{n,\alpha\alpha}^{\frac{A}{8n-4}} B, \quad (2)$$

где p_0^0 – давление в источнике, $C_{n,\alpha\alpha}$ – постоянная потенциала взаимодействия $V_{\alpha\alpha}(r) = -C_{n,\alpha\alpha}/r^n$, A и B – функции, зависящие от L_0 и условий в источнике. Из-за громоздкого вида они не приводятся (см. [11]). Здесь все величины размерные.

Далее на основе исходных данных (температура в источнике, молекулярная масса газа, время действия сопла, геометрия экспериментальной установки) рассчитываются величины A и B . Затем по зависимости $t_{\alpha\alpha}^{\text{макс}}$ от p_0^0 в логарифмических координатах можно определить n и силовую постоянную $C_{n,\alpha\alpha}$.

Метод позволяет также получить информацию о потенциале взаимодействия частиц разного сорта. Для этого нужно определить величину $n_{\alpha}(\vec{r}, t)$ в первом приближении по числу Кнудсена Kn_s [10]:

$$n_{\alpha}(\vec{r}, t) = n_0 y_0^0 Kn_s^{\frac{2n}{3n-4}} (n_1 y_{\alpha}^0 + n_0 y_{\alpha}^1).$$

Для расчета y_{α}^1 необходимо знать “скольжение” скоростей $\Delta w_{\alpha\beta}$. После несложных, но довольно громоздких преобразований можно получить удобное для обработки экспериментальных данных выражение для сдвига максимумов плотности компонентов:

$$t_{\alpha\beta}^{\text{макс}} = D \frac{3n}{3n-4} C_{n,\alpha\alpha}^{\frac{4}{3n-4}} C_{n,\alpha\beta}^{\frac{2}{3n-4}} (t_{\alpha\alpha}^{\text{макс}} - A). \quad (3)$$

Выражение (3) позволяет определить значение $C_{n,\alpha\beta}$ по экспериментальным данным аналогично случаю однокомпонентного газа. Величина D так же, как A и B , зависит от условий в сопле и геометрических параметров установки.

В заключение оценим пределы применимости предложенного метода. Выражения (2) и (3) для положения максимумов времяпролетного спектра учитывают вклад от частиц, рассеянных в детектор непосредственно от источника. Поэтому в эксперименте необходимо исключить регистрацию детектором фоновых частиц (вторичный сигнал), попадающих в детектор после рассеяния стенками вакуумной каме-

ры. Допустим, что характерные размеры рабочего объема вакуумной камеры составляют l_0 . Размеры газового пакета R_0 после пролета им базового расстояния L_0 можно оценить как:

$$R_0 = R_s + (5RT_s)^{1/2} (5RT_0^0)^{-1/2} L_0 \cong R_s + 0,3L_0.$$

Из условия невозмущения основного сигнала фоновым ($R_0 \leq l_0$) и с учетом выражения для R_s [9] можно определить верхнюю границу для времени действия сопла τ_0 :

$$\tau_0 \leq \tau_0^{\text{макс}} = 7,8 \cdot 10^{-6} (l_0 - 0,3L_0)^3 d^{-2}.$$

В реальных экспериментальных условиях ($d \cong 0,01$ см, $l_0 \cong 10$ см, $L_0 \cong 30$ см) $\tau_0^{\text{макс}}$ имеет порядок секунды. Кроме того, из выражения для $\tau_0^{\text{макс}}$ видно, что базовое расстояние L_0 не должно превышать $\sim 3l_0$, чтобы исключить возникновение фонового сигнала.

С другой стороны, должна существовать нижняя граница τ_0 , обеспечивающая существование почти непрерывного режима в точке формирования газового пакета вблизи сопла r_s [9]. Для этого нужно задаться максимальным значением числа Кнудсена в точке r_s , которое все еще обеспечивает режим, близкий к непрерывному. Из численного решения уравнения Больцмана для этой задачи [11] следует, что с приемлемой точностью можно положить $Kn_s \leq 5 \cdot 10^{-3}$. Это дает ограничение снизу на τ_0 :

$$\tau_0 \geq \tau_0^{\text{мин}} = 3 \cdot 10^{-9} d(p_0^0 d)^{-3}.$$

При этом полагалось, что $T_0^0 = 300$ К. Для типичных условий ($d = 0,01$ см и $p_0^0 = 1$ атм) $\tau_0^{\text{мин}} = 30$ мс. Интересно отметить, что соответствующие оценки, выполненные в [12, 13], для тех же условий дают близкое значение (~ 20 мс).

Наконец следует заметить, что в предложенном методе использована модель формирования сферического газового пакета на определенном расстоянии r_s , обеспечивающем непрерывность. Однако эти предположения не кажутся очень напряженными, поскольку, во-первых, в процессе расширения при достаточно больших временах $t \gg \tau_0$ газовый пакет “забывает” о начальных условиях и его первоначальная форма приближается к сферической [14], а во-вторых, обычно $r_s \ll L_0$ и место “сшивки” не влияет на конечный результат.

Таким образом, в настоящей работе на основании кинетической модели расширения импульсного пучка однокомпонентных газов и их смесей разработаны

основы нового метода определения параметров потенциала межатомного взаимодействия. Получены аналитические соотношения, связывающие положение максимума времяпролетного спектра с условиями в

источнике струи и параметрами потенциала взаимодействия. Определены пределы применимости метода по варьируемым условиям эксперимента и геометрическим параметрам установки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кулезнев Е.В., Лазарев А.В., Трубников Д.Н. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 1987. **28**. С. 117.
2. Лазарев А.В., Кулезнев Е.В., Трубников Д.Н. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 1988. **29**. С. 157.
3. Lenin L.V., Lazarev A.V., Trubnikov D.N. // Chem. Phys. Lett. 1988. **148**. P. 401.
4. Лазарев А.В., Ларин А.В., Трубников Д.Н. // Хим. физика. 1992. **11**. С. 21.
5. Лазарев А.В., Застенкер Н.Н., Трубников Д.Н. // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 2004. **45**. С. 177.
6. Трубников Д.Н. Дис. ... докт. хим. наук. М., 1992.
7. Тихонов А.Н., Арсенин В.Л. Методы решения некорректных задач. М., 1986.
8. Воскобойников Ю.Е., Преображенский Н.Г., Седельников А.И. Математическая обработка эксперимента в молекулярной газодинамике. Новосибирск, 1984.
9. 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.
10. 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.
11. Колосова Т.Ю. Дис. ... канд. хим. наук. М., 1990.
12. Saenger K.L. // J. Chem. Phys. 1981. **75**. P. 2467.
13. Saenger K.L., Fenn J.B. // J. Chem. Phys. 1983. **79**. P. 6043.
14. Greenspan H.P., Butler D.S. // J. Fluid Mech. 1962. **13**. P. 101.

Поступила в редакцию 27.09.07

KINETIC DESCRIPTION OF THE EXPANSION OF A SUPERSONIC PULSED JET INTO A VACUUM. III. METHOD OF DETERMINATION OF THE PARAMETERS OF THE ATOMIC INTERACTION POTENTIAL AT LOW TEMPERATURES

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

(Division of Physical Chemistry)

A new method of the determination of the parameters of the atomic interaction potential was suggested on the basis of the kinetic description of a supersonic pulsed jet. The analytical relationships between the position of maximum of the experimental time-of-fly spectrum, on one hand, and the source conditions and the parameters of interaction potential, on the other, have been obtained. The boundaries of applicability of the method have been determinate.