УДК 533.6.011.8

ЯВЛЕНИЯ ПЕРЕНОСА В ЧАСТИЧНО ИОНИЗОВАННОМ ГАЗЕ С УЧЕТОМ РЕАКЦИИ ИОНИЗАЦИИ

Г. Я. ГЕРАСИМОВ

(*Москва*)

Наличие реакции ионизации в газе приводит к значительному увеличению его теплопроводности. Это увеличение происходит за счет появления в выражении для коэффициента теплопроводности λ дополнительного члена, связанного с переносом энергии ионизации. Однако учет химической составляющей в λ не означает, что все остальные расчеты для коэффициентов переноса должны проводиться по формулам без учета реакции ионизации. Тем не менее в выполненных до настоящего времени расчетах используются именно эти формулы (обзор работ дан в [1]).

В настоящей работе с помощью общей схемы Людвига и Хейля [2], основанной на методе Чепмена – Энскога, произведен учет влияния равновесной реакции ионизации на коэффициенты переноса. Оказалось, что сравнительно простые результаты получаются только для коэффициента сдвиговой вязкости. В качестве примера применения полученных формул рассмотрена вязкость частично ионизованного водорода при $p=1$ *атм* в диапазоне температур 10 000–28 000° К. Расчет показывает, что наличие реакции ионизации в газе приводит к значительному снижению его вязкости. Сделан анализ проведенного расчета.

1. Решение полуклассического уравнения Больцмана. Рассмотрим частично ионизованный газ, состоящий из атомов, которые могут быть ионизованы при столкновении однозарядных ионов и электронов. Обозначим их соответственно индексами 1, 2, 3.

Считаем, что температуры компонент одинаковы, газ квазинейтрален и находится в состоянии ионизационного равновесия.

Предположим, что взаимодействия между частицами (в том числе и кулоновские) описываются в терминах парных столкновений. В плазме это приближение удается формально сохранить введением экранированного потенциала или обрезанием расходящихся интегралов столкновений на радиусе Дебая. Вопрос о правомерности указанных предположений довольно сложен и рассматриваться не будет. Чтобы сделать возможной равновесную ионизацию, будем учитывать также тройные столкновения, приводящие к рекомбинации.

Процесс ионизации при степенях ионизации $\sim 10^{-4}$ и выше обусловлен в основном столкновениями атомов с электронами. Роль столкновений атомов с тяжелыми частицами, как правило, менее существенна. Поэтому, чтобы не усложнять дальнейших вычислений, предположим, что ионизация атомов осуществляется только электронным ударом.

Для описания свойств данного газа удобно воспользоваться полуквантовомеханическим методом, в котором поступательные степени свободы рассматриваются классически, а внутренние – квантовомеханически. Введем функцию распределения $f_{pi}(\mathbf{v}_p, E_{pi}, \mathbf{r}, t)$ частиц сорта p $(p=1, 2, 3)$, находящихся в i-м квантовом состоянии с внутренней энергией $E_{pi}(E_{3i}\equiv 0)$. Тогда обобщенное уравнение Больцмана для частиц сорта p в отсутствие внешних сил запишется в виде [2]

$$\frac{\partial f_{pi}}{\partial t}+\mathbf{v}_p\frac{\partial f_{pi}}{\partial \mathbf{r}}=-\sum_q \overset{(p,q)}{I}_{pi(p,q)'}-\overset{ion}{I}_{pi} \tag{1.1}$$

$$\overset{ion}{I}_{1i}\equiv\overset{(1,3)}{I}_{1i(23,3)'},\qquad \overset{ion}{I}_{2i}\equiv\overset{(23,3)}{I}_{2i(1,3)'}$$
$$\overset{ion}{I}_{3}\equiv\overset{(3,1)}{I}_{3(3,23)'}+\overset{(3\ 23)}{I}_{3(3,1)'}+\overset{(32,3)}{I}_{3(1,3)'} \tag{1.2}$$

Члены, обусловленные столкновениями, в предположении о существовании полностью обратимых столкновений имеют вид

$$\overset{(p,q)}{I}_{pi(p,q)'}\equiv\sum_{j,k,l}\int(f_{pi}f_{qj}-f_{pk}'f_{ql}')\sigma_{pk,ql}^{pi,qj}\,d\mathbf{v}_q\,d\mathbf{v}_p'\,d\mathbf{v}_q' \tag{1.3}$$

$$\overset{(1,3)}{I}_{1i(23,3)'}\equiv\sum_k\int(f_{1i}f_3-k_{ion}f_{2k}'f_3'f_3^{*\prime})\sigma_{2k,3,3}^{1i,3}\,d\mathbf{v}_3\,d\mathbf{v}_2'\,d\mathbf{v}_3'\,d\mathbf{v}_3^{*\prime} \tag{1.4}$$

$$f_{pk}'\equiv f_{pk}(\mathbf{v}_p', E_{pk}, \mathbf{r}, t),\qquad f_3^{*\prime}\equiv f_3(\mathbf{v}_3^{*\prime}, \mathbf{r}, t),\qquad k_{ion}=(h/m_3)^3$$

Здесь h – постоянная Планка. Штрихи у скоростей означают, что эти величины берутся после столкновения. Величины $\sigma_{pk,ql}^{pi,qj}$ и $\sigma_{2k;3,3}^{1i,3}$ есть вероятности превращения в единицу времени для процессов:

(1.5) $\quad \mathbf{v}_p, E_{pi}; \quad \mathbf{v}_q, E_{qj} \to \mathbf{v}_p', E_{pk}; \quad \mathbf{v}_q', E_{ql}$

(1.6) $\quad \mathbf{v}_1, E_{1i}; \quad \mathbf{v}_3 \to \mathbf{v}_2', E_{2k}; \quad \mathbf{v}_3'; \quad \mathbf{v}_3^{*\prime}$

Решение уравнения (1.1) было получено в настоящей работе путем приложения формальных методов кинетической теории газов с внутренними степенями свободы [3] к случаю учета равновесной реакции ионизации по схеме, предложенной Людвигом и Хейлем [2]. Опуская громоздкие выкладки, укажем лишь на основные отличия, появляющиеся в рассматриваемом случае.

Функцию распределения запишем в виде

(1.7) $$f_{pi} = f_{pi}^{(0)}(1+\Phi_{pi})$$

(1.8) $$f_{pi}^{(0)} = n_p \left(\frac{m_p}{2\pi kT}\right)^{3/2} Q_p^{-1} \exp\left[-\left(\frac{m_p V_p^2}{2} + E_{pi}\right)\Big/ kT\right]$$

$$Q_p = \sum_i \exp(-E_{pi}/kT), \qquad \mathbf{V}_p = \mathbf{v}_p - \mathbf{v}_0$$

Здесь $f_{pi}^{(0)}$ – равновесное решение уравнения (1.1) [3], причем плотности n_p удовлетворяют условию ионизационного равновесия; $\mathbf{v}_0$ – среднемассовая скорость газа.

Уравнение для определения функции возмущения Φ_{pi} сохранит свой вид за исключением того, что интегральная часть его усложнится из-за наличия в правой части (1.1) ионизационных членов (1.2). Энергия ионизации, появляющаяся в дополнительных условиях для определения Φ_{pi}, в конечном итоге не повлияет на коэффициенты переноса. Поэтому феноменологическая запись коэффициентов переноса в виде отношения двух определителей остается той же, что и в работе [3], однако в рассматриваемом случае в элементы определителей добавляются члены, связанные с реакцией. Полученные формулы имеют громоздкий вид, и только коэффициент сдвиговой вязкости удается привести к сравнительно простой форме.

В настоящей работе выражения для коэффициентов переноса получены в первом приближении (в смысле разложения по полиномам Сонина и Валдмана – Трубенбахера [3]). Однако в ряде работ показано (см., например, [4]), что ошибка при расчете по ним в области полной ионизации может достигать 57% для теплопроводности, 11% для термодиффузии и 15% для вязкости (в нейтральном газе эта ошибка уменьшается до нескольких процентов). Поэтому в дальнейшем имеет смысл ограничиться рассмотрением только коэффициента сдвиговой вязкости η, выражение для которого значительно проще, чем для других коэффициентов переноса, и погрешность при вычислении которого в области полной ионизации не очень велика.

2. Вязкость, частично ионизованного газа. После пренебрежения членами порядка $\xi = (m_3/m_2)^{1/2}$ окончательное выражение для η, полученное в настоящей работе, может быть записано в форме

(2.1) $$\eta = -\begin{vmatrix} H_{11} & H_{12} & x_1 \\ H_{12} & H_{22} & x_2 \\ x_1 & x_2 & 0 \end{vmatrix} \times \begin{vmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{12} & H_{22} \end{vmatrix}^{-1}$$

(2.2) $$H_{pp} = x_p^2/\eta_p + x_1 x_2/\eta_{12} - H_{12}, \qquad p=1,2$$

(2.3) $$H_{12} = (-x_1 x_2/\eta_{12})\,({}^5/_6 A_{12}^{*-1} - 0.5 + \alpha\eta_{12}/kT)$$

$$x_p = n_p/n, \qquad n = \sum_p n_p, \qquad A_{12}^* = \Omega_{12}^{*(2,2)}/\Omega_{12}^{*(1,1)}$$

Здесь η_1 и η_2 – вязкости атомов и ионов; η_{12} – гипотетическая атом-ионная вязкость; $\Omega_{12}^{*(l,s)}$ – приведенные интегралы столкновений [3]. Появление последнего члена в (2.3) связано с учетом ионизационных интегралов (1.2) в уравнении Больцмана. Входящая в него величина α определяется формулой

$$\alpha=4\left(\frac{kT}{2\pi m_3}\right)^{1/2} Q_1^{-1}\sum_n g_n\int \varepsilon e^{-\varepsilon-E_{1n}/kT}\sigma_n(\varepsilon)\,d\varepsilon \tag{2.4}$$

где $\sigma_n(\varepsilon)$ – сечение ионизации атома с n-го энергетического уровня в зависимости от энергии налетающего электрона (деленной на kT); g_n – статистический вес n-го энергетического уровня В предельном случае, когда эффекты, связанные с реакцией, малы, этот член пропадает и выражения (2.1) – (2.3) принимают обычный вид [3, 5].

Формула (2.1) показывает, что вязкость связана главным образом с тяжелыми компонентами (атомами и ионами). Вязкие натяжения, обусловленные электронами, как правило, малы. Например, для водорода учет членов порядка ξ в η дает поправку, не превышающую 4% (без учета реакции) [5]. Наличие реакции приводит к уменьшению этой поправки.

В качестве примера рассмотрим применение формул (2.1) – (2.4) для вычисления вязкости частично ионизованного водорода. Величина α может быть вычислена с помощью сечения, полученного на основе классической теории. Если считать, что атомный электрон характеризуется только одним средним параметром – энергией ионизации, то из соображений размерности наиболее общая зависимость сечения отрыва этого электрона от энергии столкновения имеет вид [6]

$$\sigma_n(\varepsilon)=4\pi a_0^2(\varepsilon_1/\varepsilon_n)^2 f(\varepsilon/\varepsilon_n) \tag{2.5}$$

где $f(x)$ – произвольная функция. Здесь $\varepsilon_n=I/n^2kT$, I – потенциал ионизации атома водорода с основного уровня, a_0 – боровский радиус. Подставляя (2.5) в (2.4), получаем

$$\alpha=4\pi a_0^2\left(\frac{8kT}{\pi m_3}\right)^{1/2}\frac{\varepsilon_1^2}{u}\sum_n g_n e^{\varepsilon_n-\varepsilon_1}\int_1^\infty W_n(x)f(x)\,dx \tag{2.6}$$

$$u=Qe^{-\varepsilon_1},\qquad g_n=2n^2,\qquad W_n(x)=xe^{-\varepsilon_n x}$$

Эффекты взаимодействия частиц в газе приводят к срезанию верхних возбужденных уровней в атомах. Поэтому суммирование в (2.6) должно проводиться от 1 до некоторого числа m.

Если при рассмотрении процесса ионизации воспользоваться классической моделью Томсона, то $f(x)=(x-1)/x^2$. Подставив эту функцию в (2.6) и заменив суммирование по n интегрированием, после несложных преобразований получаем

$$\alpha(m,T)=4\pi a_0^2(8kT/\pi m_3)^{1/2}u^{-1}\varepsilon_1^{7/2}e^{-\varepsilon_1}F(m,T) \tag{2.7}$$

$$u(m,T)=2+\varepsilon_1^{3/2}e^{-\varepsilon_1}\int_{\varepsilon_m}^{\varepsilon_1} x^{-5/2}e^x\,dx \tag{2.8}$$

$$F(m,T)=\int_{\varepsilon_m}^{\varepsilon_1} x^{-5/2}e^x[e^{-x}/x+Ei(-x)]\,dx \tag{2.9}$$

где $Ei(x)$ – интегральная показательная функция.

Окончательный расчет вязкости проводился по формулам (2.1) – (2.3), (2.7) – (2.9) при давлении $p=1$ *атм* в диапазоне температур от 10 000 до 28 000° К. Исходные данные для расчета были приняты в соответствии с [5]. Величина m определялась по формуле [7]

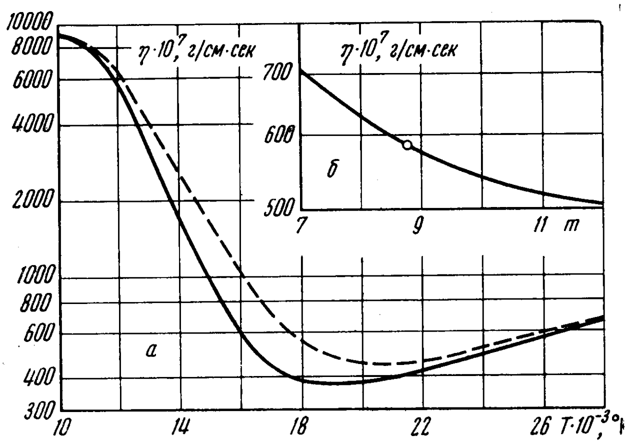
$$m=(r/a_0)^{1/2}\exp(\lambda r/4)[8(1+\lambda r)]^{-1/4} \tag{2.10}$$

$$\lambda=(4\pi n_2 e_2^2/kT)^{1/2},\qquad r=(4/3\pi n_2)^{-1/3}$$

Результаты расчета представлены на фиг. 1, *а* (сплошная линия), где для сравнения показана вязкость, рассчитанная без учета реакции [5] (пунктирная линия). Видно, что наличие реакции ионизации в газе приводит к значительному снижению его вязкости.

3. **Анализ проведенного расчета.** Вопрос о точности расчета по формулам (2.1) — (2.3) без учета последнего члена в (2.3) подробно рассмотрен в работе [5]. Поэтому остановимся на анализе лишь тех аппроксимаций, которые использовались при вычислении α.

Прежде всего отметим тот факт, что при больцмановском распределении по уровням атомы ионизуются в основном с верхних уровней, причем роль возбужденных состояний тем больше, чем выше степень возбуждения. Это хорошо видно из (2.9): подынтегральная функция в выражении для $F(m,T)$ стремится к бесконечности при $x\to 0$. Следовательно, функция $F(m,T)$ сильно чувствительна к изменению нижнего предела интегрирования, т. е. к выбору m.

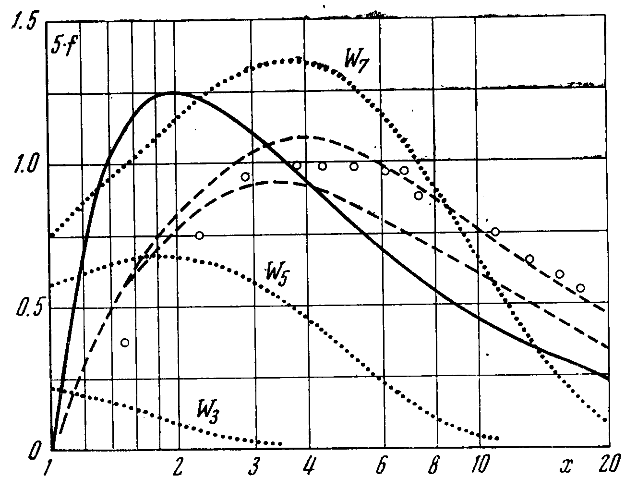


Фиг. 1

В работе [7] есть ссылка на экспериментальную работу, в которой исследовалось исчезновение спектральных линий в плазме, обусловленное внутриплазменным взаимодействием. Оказалось, что при $p=1$ *атм* и $T=17\,415°$ K (1.5 *эв*) экспериментальное значение $m=7$. Расчет же по формуле (2.10) дает $m\sim 9$ при $T=15\,000-28\,000°$ K. В связи с этим было проведено варьирование величины m в формуле (2.7) в пределах от 7 до 12 при $T=16\,000°$ K. Полученная при этом зависимость $\eta(m)$ представлена на фиг. 1, *б*.

Анализ фиг. 1 показывает, что учет семи возбужденных уровней, наблюдаемых в эксперименте, приводит к снижению вязкости на 30%. При больших m функция $\eta(m)\to\eta_{\lim}$, где

$$\eta_{\lim}=(x_1+x_2)^2(x_1^2+\eta_1+x_2^2/\eta_2+2x_1x_2/\eta_{12})^{-1} \tag{3.1}$$



Фиг. 2

В данном случае $\eta_{\lim}=498\cdot10^{-7}$ *г/см·сек*. Поэтому максимальное снижение вязкости за счет реакции при $T=16\,000°$ К не должно превышать 50% (см. фиг. 1). Отметим, что для более строгого анализа необходимо учесть зависимость x_p от m.

Рассмотрим вопрос о том, как влияет выбор функции $f(x)$, входящей в полуэмпирическую формулу (2.5), на окончательные результаты. На фиг. 2, взятой из [6], представлен график функции $f(x)$, вычисленной на основании классической теории Гризинского (пунктирная линия), и значения этой функции, полученные из экспериментальных данных (кружки). Для сравнения приведена функция $f(x)=(x-1)/x^2$ (сплошная линия), а также функция $W_n(x)$, вычисленная при $T=11\,610°$ К (1 *эв*).

Анализ фиг. 2 показывает, что при ионизации с нижних уровней основной вклад в интеграл, стоящий в правой части (2.6), дает пороговая область функции $f(x)$. Поэтому использование томсоновской функции $f(x)$ приведет здесь к явно завышенным результатам. Но в рассматриваемом случае основной вклад в α дают верхние уровни, а для них максимум функции $W_n(x)$ сдвигается вправо, причем этот сдвиг растет с ростом n и T (см. фиг. 2). Поэтому использование здесь томсоновской функции $f(x)$ не должно привести к большой ошибке. Отметим, что при $T=16\,000°$ К и $m=9$ изменение α в 2 раза приводит к изменению η менее чем на 5%.

Автор благодарит Г. И. Петрова, В. Б. Баранова и В. Б. Леонаса за обсуждение полученных результатов и ряд ценных замечаний.

Поступила 30 I 1973

ЛИТЕРАТУРА

1. *Кулик П. П.* Упругие взаимодействия и явления переноса. В сб. «Очерки физики и химии низкотемпературной плазмы». М., «Наука», 1971.
2. *Людвиг Г., Хейль М.* Теория пограничного слоя с диссоциацией и ионизацией. В сб. «Проблемы механики», вып. 4. М., Изд-во иностр. лит., 1963.
3. *Monchick L., Yun K. S., Mason E. A.* Formal kinetic theory of transport phenomena in polyatomic gas mixtures. J. Chem. Phys., 1963, vol. 39, № 3.
4. *Devoto R. S.* Transport coefficients of partially ionized hydrogen. J. Plasma Phys., 1968, vol. 2, pt. 4.
5. *Белов В. А.* Вязкость частично ионизованного водорода. Теплофизика высоких температур, 1967, т. 5, № 1.
6. *Смирнов Б. М.* Атомные столкновения и элементарные процессы в плазме. М., Атомиздат, 1968.
7. *Кудрин Л. П.* К уравнению состояния частично ионизованного водорода. ЖЭТФ, 1961, т. 40, № 4.