СОДЕРЖАНИЕ

Том 59, номер 1, 2021

ИССЛЕДОВАНИЕ ПЛАЗМЫ

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВ

ТЕПЛОМАССООБМЕН И ФИЗИЧЕСКАЯ ГАЗОДИНАМИКА

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР, 2021, том 59, № 1, с. 3–11

ИССЛЕДОВАНИЕ ПЛАЗМЫ

УДК 533.93

ТРЕХКОМПОНЕНТНАЯ ХИМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ “ДЛЯ ПОЛЬЗОВАТЕЛЕЙ”

© 2021 г. А. Л. Хомкин[1, *], А. С. Шумихин[1]

[1]Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

*E-mail: alhomkin@mail.ru

Поступила в редакцию 07.06.2020 г.
После доработки 09.09.2020 г.
Принята к публикации 14.10.2020 г.

Предложена химическая модель неидеальной атомарной плазмы, состоящей из электронов, ионов и атомов. Цель работы – построение достаточно надежного и простого варианта химической модели атомарной неидеальной плазмы (“для пользователей”), расчет по которой был бы доступен любому молодому научному сотруднику. Уверенность в ее надежности обусловлена накопленным опытом работы и тем, что для учета эффектов неидеальности используются теоретически обоснованные, проверенные экспериментом соотношения. Выполнен критический анализ основных проблем учета межчастичных взаимодействий в химически реагирующей атомарной плазме с акцентом на кулоновское взаимодействие.

DOI: 10.31857/S0040364421010087

ВВЕДЕНИЕ

Прошло уже более 50 лет, как в нашей стране и за рубежом были развернуты исследования различных свойств неидеальной плазмы в широком диапазоне параметров. С результатами этих исследований можно ознакомиться в [1]. Они имели как прикладной, так и общефизический аспект, а их начало совпало с развертыванием в СССР работ по ряду энергетических проектов. Это в первую очередь работы по созданию газофазного ядерного реактора [2] и мощных МГД-генераторов. В области теории определенное стимулирующее значение имел обзор Нормана, Старостина [3], в котором выдвигалась гипотеза о возможном существовании плазменного фазового перехода. Одним из главных методов расчета уравнения состояния, равновесного состава и на их основе кинетических коэффициентов стал метод смеси и построенные с его применением химические, многокомпонентные газоплазменные модели.

Разнообразие моделей и их достаточная сложность были обусловлены тем, что авторы стремились создать модели широкодиапазонные, охватывающие максимально широкий диапазон плотностей (от твердотельных до газовых) и температур (от тысяч до миллионов градусов). Особенно высокая потребность в таких моделях возникала в астрофизике для описания внутреннего состояния звезд и планет, а также в физике высоких плотностей энергии для описания превращений вещества при ударном сжатии. Естественным образом возникала необходимость учета эффектов неидеальности при отсутствии малых параметров и при наличии химических реакций, что приводило к построению сложных интерполяционных соотношений [4–10]. Следует отметить, что определенные проблемы возникали и в связи с теоретическим предсказанием возможности существования плазменного фазового перехода в плотной плазме, представленным в [3]. Авторы моделей, которые верили в его существование, включали такую возможность в разрабатываемую модель. И наоборот. Отметим для примера достаточно известные в литературе химические модели для водорода и инертных газов [4–8, 10], паров металлов [7–9] и т.д. Некоторые из них содержат плазменный фазовый переход, а некоторые не содержат. Все упомянутые модели являются достаточно сложными, и их можно назвать “авторскими”, поскольку повторить их практически невозможно и тем более использовать в экспресс-расчетах, не прибегая к помощи авторов.

В данной работе предлагается химическая модель неидеальной плазмы, как говорят, “для пользователей”, т.е. простая и надежная. Из всего разнообразия плазменных состояний рассматривается неидеальная плазма, которая представляет собой смесь электронов, ионов и атомов – атомарную плазму. Электронная компонента считается невырожденной, классической. Такая плазма охватывает достаточно большую область фазовой диаграммы вещества: по температуре – от нескольких тысяч до десятков тысяч градусов (где начинается вторая ионизация), по плотности – от разреженной и вплоть до критических плотностей, где возникает дефицит малых параметров. Сознательно упрощая номенклатуру частиц (до трех), сосредоточим внимание на проблемах учета эффектов неидеальности в химически реагирующей плазме, по которым, несмотря на 50 лет исследований, ясности нет до сих пор, даже для плазмы атомарной.

Формальными, но легко устранимыми ограничениями области применимости предлагаемой модели являются многократная ионизация, появление молекул и эффекты вырождения электронного газа. Учет этих эффектов для различных химических плазменных моделей несложен и достаточно единообразен.

ОБЩИЕ СООТНОШЕНИЯ

В многочисленных химических моделях, предложенных к настоящему времени, учитываются десятки, а иногда и сотни компонент. В качестве примера можно привести уникальный математический код “SAHA-S”, созданный для учета тонких плазменных эффектов, протекающих на Солнце с учетом многочисленных примесных добавок, в котором учтены около сотни компонент [11]. Это, конечно, штучный, авторский продукт, для создания которого нужны уникальный опыт и много времени.

Большинство различий между моделями обусловлены выбором межчастичных потенциалов и способом расчета поправок на взаимодействие “свободных” частиц как нейтральных, так и заряженных в газоплазменной смеси с реакциями. Отсутствие единого мнения в этом вопросе до настоящего времени связано с одной причиной — недостаточной теоретической обоснованностью самого метода смеси для систем с реакциями.

В настоящей работе ограничимся небольшим числом компонент, чтобы порекомендовать наиболее надежные с точки зрения авторов способы расчета поправок на неидеальность.

Рассмотрим неидеальную смесь атомов N_a, ионов N_i и электронов N_e. Система занимает объем V и находится при температуре $kT = 1/\beta$. Свободную энергию смеси F можно представить в виде идеально-газового слагаемого F^0 и добавки ΔF, описывающей эффекты взаимодействия между частицами:

$$F = F^0 + \Delta F, \quad F^0 = -kT\sum_l N_l \ln\left(\frac{\mathrm{e}VQ_l}{N_l\lambda_l^3}\right), \quad l = a,\, i,\, e, \tag{1}$$

$$\Delta F = \Delta F_{\text{ch-ch}} + \Delta F_{\text{ch-}a} + \Delta F_{a\text{-}a}. \tag{2}$$

В (1) e — основание натурального логарифма, $\lambda_l = \sqrt{2\pi\hbar^2\beta/m_l}$ — тепловая длина волны Де-Бройля частицы сорта l, Q_l — внутренняя статистическая сумма частицы сорта l. Слагаемые в правой части (2) соответствуют поправкам на неидеальность за счет взаимодействий заряд—заряд, заряд—атом и атом—атом.

В общем виде статистическую сумму частицы сорта l можно представить как:

$$Q_l = g_l \exp(\beta E_l),$$

где g_l, E_l — статистический вес и энергия связи частицы сорта l. Подробное описание методики расчета этих величин можно найти во многих монографиях, посвященных физике низкотемпературной плазмы [1, 12].

Для удобства в табл. 1 представлены расчетные формулы для настоящей модели. Необходимые для расчета константы можно найти в общедоступных справочниках; g_{ik} — статистические веса ионов (если есть низколежащие уровни); ΔE_1 — энергия возбуждения первого ионного уровня (для ионов инертных газов, см., например, [13]); g_{ak}, E_{ak} — статистические веса и энергия связи электрона в атоме соответственно. Проблеме ограничения формально расходящейся статистической суммы атома посвящены десятки и даже сотни работ. Практика показала, что для расчетов можно использовать практически любой сходящийся вариант: от статсуммы в приближении Планка—Ларкина до статсуммы в приближении ближайшего соседа (ПБС). Не годится к использованию единственная статистическая сумма из ранее предлагавшихся — это статистическая сумма по уровням, рассчитанным в дебаевском потенциале. Заметим сразу, что главным источником неустойчивостей в термодинамике является не статсумма, а снижение потенциала ионизации, вызванное кулоновским взаимодействием свободных зарядов, и поправка к давлению.

В дальнейшем понадобятся химические потенциалы частиц $\beta\mu_l = \partial\beta F/\partial N_l$.

Таблица 1. Необходимые константы и соотношения для уравнения Саха

	Статистический вес g_l	Энергия связи E_l
Электрон e	$g_e = 2$	$E_e = 0$
Ион i	$g_i = g_{i0} + g_{i1}\exp(-\beta\Delta E_1) + \ldots$	$E_i = 0$
Атом a	$g_a = \exp(-\beta I)\sum_k g_{ak}\exp(\beta E_{ak})$	$E_a = I$

Для определения трех неизвестных величин N_a, N_i, N_e имеем три уравнения:
уравнение для полного числа ядер

$$N = N_a + N_i,$$

уравнение электронейтральности

$$N_e = N_i,$$

уравнение ионизационного равновесия

$$\beta\mu_a = \beta\mu_e + \beta\mu_i. \tag{3}$$

Для химического потенциала в температурных единицах запишем

$$\beta\mu_l = -\beta E_l - \ln\left(\frac{Vg_l}{N_l\lambda_l^3}\right) + \frac{\partial\beta\Delta F}{\partial N_l}. \tag{4}$$

Подставляя химические потенциалы (4) в (3) и вводя степень ионизации $\alpha = N_e/N$, получим уравнение ионизационного равновесия – формулу Саха:

$$\frac{1-\alpha}{\alpha^2} = \frac{g_a}{2g_i} n\lambda_e^3 \exp\left(\beta I + \frac{\partial\beta\Delta F}{\partial N_e} + \frac{\partial\beta\Delta F}{\partial N_i} - \frac{\partial\beta\Delta F}{\partial N_a}\right). \tag{5}$$

Решением нелинейного уравнения (5) является функция $\alpha(\beta, n)$, из которой можно вычислить состав плазмы и уравнение состояния. Здесь и в дальнейшем $n_l = N_l/V$ – соответствующие концентрации частиц.

ВИРИАЛЬНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Первая поправка к свободной энергии, вызванная взаимодействием частиц с потенциалом $V(r)$, определяется вторым вириальным коэффициентом $B_{i,j}(T)$. Для различных частиц имеем

$$\beta\Delta F = -\frac{N_i N_j}{V} B_{i,j}(T),$$

а для одинаковых добавляется множитель $1/2$.

Для расчета второго вириального коэффициента существуют два соотношения:
классическое

$$B_{i,j}^{\mathrm{cl}} = \int d\mathbf{r}\left(\exp(-\beta V(r)) - 1\right) \tag{6}$$

и квантовое (формула Бета–Уленбека)

$$\begin{gathered} B_{i,j}^{qw}(T) = \sum_k g_k \exp(-\beta\varepsilon_k) + \\ + \frac{\lambda_e^3}{\pi}\int_0^\infty \sum_l (2l+1)\frac{d\delta_l}{dp}\exp\left(-\frac{\beta p^2}{2m_e}\right)dp. \end{gathered} \tag{7}$$

Здесь $g_k, \varepsilon_k, \delta_l$ – статистические веса, энергии связи и фазы рассеяния парных состояний. Судьба этих соотношений сложилась по-разному, особенно применительно к моделям смеси. Сразу отметим, что формулы (6) и (7) весьма различные. Формула (6) содержит интегрирование по всем расстояниям пары взаимодействующих частиц без разделения состояний на связанные и свободные. Формула (7), наоборот, не содержит интегрирования по расстояниям и состоит из двух слагаемых: первое слагаемое соответствует вкладу связанных состояний, а второе – вкладу свободных или состояниям рассеяния. Казалось бы, именно соотношение (7) следовало бы использовать в системе с реакциями образования парных связанных состояний. Но здесь подстерегают проблемы. Первое слагаемое в (7), как правило, значительно больше второго, и использование непосредственно выражения (7) ведет к абсурду (в каноническом ансамбле). Успешным оказалось его использование в большом каноническом ансамбле (БКА). Для атомарной плазмы в [13] рассчитан квантовый второй вириальной коэффициент и получено уравнение состояния в этом приближении. В работе Семенова А.М. [14] предложен метод исходных атомов и получены уравнения состояния высокой точности для атомарно-молекулярных паров щелочных металлов на основе квантового второго вириального коэффициента (7). Применительно к газоплазменным моделям с одновременным учетом молекул и заметной ионизацией строгих результатов не существует. Видимо, по этой причине химические модели неидеальных, химически реагирующих смесей столь разнообразны. Большинство исследователей, но не все, приняло такую точку зрения: первое слагаемое в (7) необходимо учитывать в виде вклада отдельной компоненты, а второе – как поправку на взаимодействие в непрерывном спектре. Будем исходить из этой концепции.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЗАРЯД–ЗАРЯД $\Delta F_{\mathrm{ch-ch}}$

Это слагаемое породило интенсивную, многолетнюю дискуссию, которая не окончилась и поныне. Обстоятельный обзор основных достижений теории к концу 1960-х гг. и формулировка нерешенных проблем даны в известном обзоре Нормана и Старостина [3]. С последними достижениями можно ознакомиться в [1]. Остановимся на тех из них, которые сохранили свою актуальность в расчетных моделях и в настоящее время. Прежде всего это классическая теория Дебая для электролитов, которая позволила вычислить добавку к свободной энергии в системе заряженных шаров с диаметром D:

$$\Delta F_{\mathrm{D}} = \begin{cases} -(N_e + N_i)\frac{1}{3}q^2 \Big/ (R_{\mathrm{D}} + D) \text{ – электролиты}, \\ -(N_e + N_i)\frac{1}{3}q^2 \Big/ R_{\mathrm{D}} \text{ – плазма}, \end{cases} \tag{8}$$

где q – заряд шара, а $R_{\mathrm{D}} = 1\Big/\sqrt{4\pi\beta q^2(n_e + n_i)}$ – дебаевский радиус. Для плазменных моделей было принято $D = 0$, при этом молчаливо обходился вопрос о сходимости других членов вириального ряда. Для заряженных шаров они конечны, а для точечных зарядов все расходятся, кроме последовательности кольцевых диаграмм. Именно она и приводит к конечному результату (8) с $D = 0$. Химические модели с его использованием в дальнейшем будем называть дебаевской моделью. Естественно, эти результаты справедливы там, где применимо представление о коллективном самосогласованном характере экранирования заряда (существование функциональной связи плотности частиц и плотности заряда в уравнении Пуассона–Больцмана – приближение сплошной среды). Это требование подразумевает выполнение очевидного неравенства

$$R_{\mathrm{D}} \geq R_i, \tag{9}$$

где R_i – радиус ионной ячейки Вигнера–Зейца

$$R_i = \left(\frac{3}{4\pi n_i}\right)^{1/3}.$$

Как правило, неравенство (9) игнорируется и выражение (8) с $D = 0$ используется в расчетах далеко за границами его применимости. Из неравенства (9) следует, что в сфере с радиусом R_{D} должно находиться много (больше единицы) частиц. Введем дебаевский параметр кулоновской неидеальности

$$\Gamma = \frac{\beta e^2}{R_{\mathrm{D}}} = \beta e^2 \sqrt{4\pi\beta e^2 (n_e + n_i)}. \tag{10}$$

В литературе также используется параметр неидеальности, иногда называемый маделунговским:

$$\gamma = \frac{\beta e^2}{R_i} = \beta e^2 \left(\frac{4\pi n_i}{3}\right)^{1/3}. \tag{11}$$

Неравенство (9) будет тогда выглядеть как $\Gamma \leq \gamma$. Используя связь между параметрами $6\gamma^3 = \Gamma^2$, приходим к весьма важному неравенству, определяющему границы применимости дебаевской теории и связанному с коллективным характером экранировки (приближение сплошной среды):

$$\Gamma \leq \frac{1}{6}. \tag{12}$$

Неравенство (12) очень жесткое и ведет к неожиданному выводу: для учета эффектов неидеальности в низкотемпературной плазме дебаевская теория вообще не нужна, поскольку в области ее применимости (12) эффекты неидеальности малы и, следовательно, их можно не учитывать.

Сторонники плазменного фазового перехода, как правило, игнорируют это неравенство. Во всех теориях, его предсказывающих, используется в том или ином виде дебаевский результат (8) с $D = 0$, при этом получаемые критические точки перехода лежат в области $\Gamma = 4$–16, т.е. вне границ применимости дебаевского приближения (12). Это обстоятельство, на взгляд авторов, и разделило исследователей на две группы.

Многочисленные эксперименты подтвердили весьма ограниченную область применимости дебаевской теории в плазме. Использование дебаевской поправки в чистом виде давало наихудшее согласие с экспериментальными данными и не обнаруживало существования плазменного фазового перехода в области, предсказанной в [3]. Сторонниками плазменного фазового перехода были предложены различного рода интерполяционные соотношения, среди которых наиболее известна Pade-аппроксимация [15, 16], в которой используется дебаевский результат (8) в комбинации с результатами Маделунга и Гелл-Мана–Брюкнера [17]. Соотношения, предложенные в [15], достаточно сложны, но веских оснований для их применения нет. Рекомендуем для этой поправки простейшее соотношение, основанное на приближении ближайшего соседа. Это приближение использует представление о максимальной величине энергии кулоновского притяжения в ионизованной компоненте плазмы. В плазме низкотемпературной, в отличие от высокотемпературной, свободный электрон всегда находится рядом с ионом и экранирует его (срабатывает больцмановская экспонента). Энергия их взаимодействия и является основным вкладом в полную энергию взаимодействия электрона с плазмой:

$$\Delta F_{\mathrm{ch-ch}} = \frac{N_e + N_i}{2} c \frac{e^2}{R_i}. \tag{13}$$

Регулярный вывод соотношения (13) для плазмы отсутствует, поэтому свободу выбора константы c оставляем авторам химических моделей. Очевидно, что ее величина близка к единице, у Маделунга $c = 0.895$. В [18] $c = 3/4$, что приводит к простейшему выражению для снижения потенциала ионизации. Возможен и иной выбор. Выражением (13) формально можно пользоваться и в разреженной плазме, поскольку обе поправки (10) и (11) в этом случае малы. Главное, что при $\Gamma > 1/6$ выражение (13) дает значительно меньшую энергию, нежели e^2/R_{D}. В табл. 2 приведены соответствующие поправки к давлению, внутренней энергии и снижению потенциала ионизации на основе (13).

В [19, 20] предпринята попытка учесть эффект ограничения фазового пространства для “свободных” частиц, взаимодействующих с кулоновским потенциалом. Показано, что вклад взаимодействия свободных заряженных частиц в термодинамические функции плазмы еще меньше, чем (13).

Отметим завоевавшее популярность приближение Ликальтера [21] или дебаевское приближе-

Таблица 2. Поправки на идеальность

	Дебаевское приближение	ПБС
$\beta\Delta F/V$	$-(n_e+n_i)\dfrac{\Gamma}{3}$	$-(n_e+n_i)c\dfrac{\gamma}{2}$
$\beta\Delta P$	$-(n_e+n_i)\dfrac{\Gamma}{6}$	$-(n_e+n_i)c\dfrac{\gamma}{6}$
$\beta\Delta E/V$	$-(n_e+n_i)\dfrac{\Gamma}{2}$	$-(n_e+n_i)c\dfrac{\gamma}{2}$
$\beta\Delta I$	$-\Gamma$	$-\dfrac{4}{3}c\gamma$

ние в БКА, иногда называемое “большой Дебай”. Это приближение изложено и в оригинальной статье [21], и в монографиях [1, 22]. Приближение Ликальтера возникло как альтернатива дебаевскому приближению и в дальнейшем широко использовалось и используется в плазменных моделях. Оно дает результаты, близкие к ПБС, и тоже может быть рекомендовано для экспресс-расчетов как весьма удачная экстраполяция, хотя теоретически оно слабо обосновано. Приведем основные соотношения этого приближения.

Введем понятие активности $z_{e,i}$ – эффективной плотности электронов и ионов, по которым идет разложение в БКА. Возникает плазменный параметр $\alpha = \beta e^2\sqrt{4\pi\beta e^2(z_e+z_i)}$, который связан с параметром Γ в уравнении Ликальтера

$$\Gamma^2 = \alpha^2\left(1+\frac{\alpha}{2}\right).$$

Решением этого уравнения является функция $\alpha(\Gamma)$, которая позволяет рассчитать все поправки на кулоновскую неидеальность. Например, поправку к давлению и снижение потенциала ионизации:

$$\beta\Delta P = -(n_e+n_i)\left(\frac{\alpha/6}{(1+\alpha/2)}\right),\quad \beta\Delta I = -2\ln\left(1+\frac{\alpha}{2}\right).$$

Приближение Ликальтера завоевало заметную популярность своей простотой, связью, пусть и формальной, с дебаевским приближением в условиях отсутствия строгих результатов. Плазменного фазового перехода приближение Ликальтера не содержит.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРОН–АТОМ ΔF_{e-a}

В химических моделях для учета этого вида взаимодействия используется как классический вириальный коэффициент (6), так и квантовый (7) [23]. Для взаимодействия электрон–атом в случае, если существует стабильный отрицательный ион, рекомендуем использовать член с нулевым моментом второго слагаемого (7).

Для расчета фазы рассеяния с нулевым моментом можно, не конкретизируя вид потенциала взаимодействия электрон–атом, воспользоваться приближением Вигнера для описания резонансного рассеяния электронов с импульсом p на атомной системе, с которой он образует слабосвязанное состояние с энергией связи E_A [24]:

$$\operatorname{ctg}\delta_0 = \frac{\sqrt{2m_eE_A}}{p}.$$

После несложных преобразований получим

$$B_{ea}^{\mathrm{H}}(T) = \frac{\lambda_e^3}{2}\left(1-\Phi\left(\sqrt{\beta E_A}\right)\exp(\beta E_A)\right), \tag{14}$$

где $\Phi(x)$ – функция ошибок. При низких температурах ($\beta E_A \gg 1$) формула (14) переходит в известное выражение для вириального коэффициента $B_{ea}^{\mathrm{H}}(T) = \lambda_e^2 L$ через длину рассеяния, которая в данном случае определяется соотношением $L = a_0\sqrt{\mathrm{Ry}/E_A}$ (где Ry – энергетическая постоянная Ридберга). В результате

$$B_{ea}^{\mathrm{H}}(T) = 4\pi a_0^3\beta\,\mathrm{Ry}\sqrt{\frac{\mathrm{Ry}}{E_A}}.$$

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИОН–АТОМ ΔF_{i-a} И АТОМ–АТОМ ΔF_{a-a}

Вклад состояний непрерывного спектра в квантовый второй вириальный коэффициент подробно рассмотрен Хиллом в монографии [25]. Им показано, что для взаимодействия тяжелых частиц следует использовать его квазиклассическое представление, которое для двух частиц, взаимодействующих с потенциалом $V(r)$, имеет вид (индекс H означает по Хиллу [25]):

$$\begin{aligned} B^{\mathrm{H}}(T) &= 4\pi\int_0^\sigma r^2dr\left[\exp(-\beta V(r)) - 1\right] + \\ &+ 4\pi\int_\sigma^\infty r^2dr\left[\exp(-\beta V(r))\frac{\Gamma(3/2,-\beta V(r))}{\Gamma(3/2)} - 1\right], \end{aligned} \tag{15}$$

где $\Gamma(3/2, x)$ – неполная гамма-функция. Кажущаяся сложность выражения (15) сделала его малопопулярным в практических химических моделях. Их разработчики часто обращались к более простому, классическому выражению (6), но использовали при этом для расчета тот или иной псевдопотенциал или разного рода процедуры обрезания [8]. Однако применение исходного потенциала, например, для учета взаимодействия между свободными атомами в смеси с молекулами приводит к абсурду и оправдано лишь в случае атомов инертных газов, молекул не образующих.

В работе [26] подробно рассмотрены вириальные коэффициенты для атом-атомных и ион-атомных взаимодействий с использованием квазиклассического второго вириального коэффициента (7) для потенциалов Леннард-Джонса. Здесь приведем точные и приближенные формулы для расчета вторых вириальных коэффициентов.

Определим параметры потенциала Леннард-Джонса, описывающие взаимодействие ион—атом и атом—атом:

$$V_{n,m}(D,\sigma,r) = \frac{D(n/m)^{m/(n-m)}}{1-m/n}\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^n - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^m\right].$$

В табл. 3 приведены необходимые для конкретных расчетов величины, где C_{VdW} — константа Ван-дер-Ваальса, α_D — поляризуемость атома в атомных единицах (a_0 — боровский радиус). Для водорода, например, они равны 6.5 и 4.5 соответственно. Вводя безразмерную переменную $x = r/\sigma$, получим

$$B^{\rm H}(\sigma,\varepsilon) = \frac{4\pi\sigma^3}{3}F^{\rm H}(\varepsilon),$$

$$F^{\rm H}(\varepsilon) = 3\int_0^1 x^2 dx \times$$

$$\times [\exp(-\beta V(x)) - 1] + 3\int_1^\infty x^2 dx \times$$

$$\times \left[\exp(-V(x))\frac{\Gamma(3/2, -\beta V(x))}{\Gamma(3/2)} - 1\right].$$

Для функций $F^{\rm H}(\varepsilon)$ Муленко И.А. [27] были предложены весьма точные аппроксимации, которые для a–a (12–6) и i–a (12–4) взаимодействий имеют вид

$$F^{\rm H}_{aa}(\varepsilon) = 1.2\varepsilon[1 - 0.01\varepsilon],$$

$$F^{\rm H}_{ia}(\varepsilon) = 4.29\varepsilon[1 - 0.0063\varepsilon].$$

Окончательные выражения для квазиклассических вириальных поправок неожиданно оказываются существенно проще, чем соответствующие выражения даже для расчета по классической формуле (6). Для полноты они внесены в табл. 3. Итоговая поправка к свободной энергии за счет эффектов неидеальности химической модели “для пользователей” имеет вид

$$\frac{\beta\Delta F}{V} = -(n_e + n_i)c\frac{\gamma}{2} - n_e n_a B^{\rm H}_{ea}(T) -$$

$$- n_i n_a B^{\rm H}_{ia}(\varepsilon) - \frac{n_a n_a}{2}B^{\rm H}_{aa}(\varepsilon).$$

ПРИМЕРЫ РАСЧЕТОВ. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Прежде всего, обсудим некоторые особенности учета кулоновской неидеальности, самой дискутируемой в литературе по неидеальной плазме. Конечно, это будет авторская позиция, тем более что дискуссия по данному вопросу продолжается.

Рассмотрим относительное поведение поправок на кулоновскую неидеальность в различных моделях. В качестве переменной выберем параметр Γ (10), определяемый через исходные плотности заряженных частиц. На рис. 1 представлены графики зависимостей “параметров неидеальности”, рассчитанных в различных приближениях.

Таблица 3. Величины, необходимые для расчета взаимодействия частиц

Атом—атом	
$\varepsilon = \beta D_{aa}$	
$n = 12,\ m = 6$	$\sigma = a_0\left(\dfrac{C_{VdW}\mathrm{Ry}}{2D_{aa}}\right)^{1/6}$
$B^{\rm H}_{aa}(\sigma,\varepsilon) = \dfrac{4\pi\sigma^3}{3}F^{\rm H}_{aa}(\varepsilon)$ $F^{\rm H}_{aa}(\varepsilon) = 1.2\varepsilon(1 - 0.01\varepsilon)$	
Ион—атом	
$\varepsilon = \beta D_{ia}$	
$n = 12,\ m = 4$	$\sigma = a_0\left(\dfrac{2\alpha_{\rm D}\mathrm{Ry}}{3\sqrt{3}D_{ia}}\right)^{1/4}$
$B^{\rm H}_{ia}(\sigma,\varepsilon) = \dfrac{4\pi\sigma^3}{3}F^{\rm H}_{ia}(\varepsilon)$ $F^{\rm H}_{ia}(\varepsilon) = 4.29\varepsilon(1 - 0.0063\varepsilon)$	

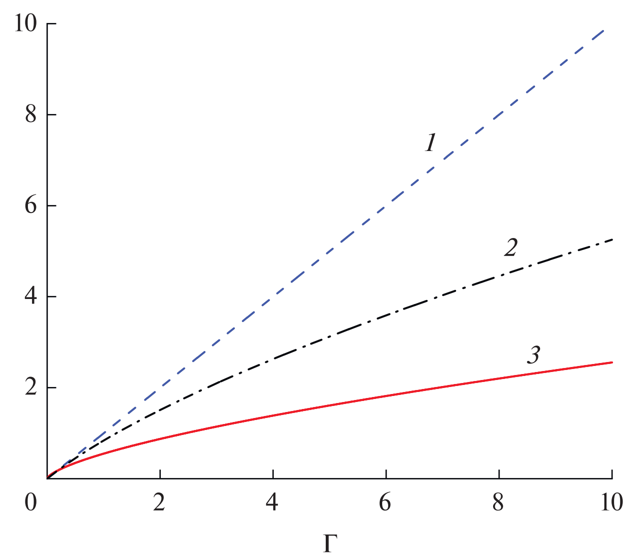


Рис. 1. “Параметры неидеальности” в различных моделях: *1* – дебаевская модель Γ, *2* – модель Ликальтера α(Γ), *3* – приближение ближайшего соседа γ(Γ).

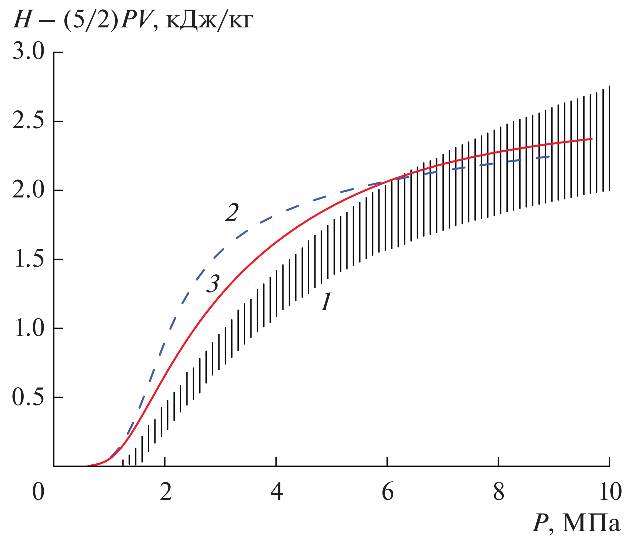


Рис. 2. Изохора цезия $V = 200$ см^3/г: *1* – полоса данных эксперимента, *2* – дебаевское приближение, *3* – ПБС.

Область применимости дебаевской теории ($\Gamma \leq 1/6$) в выбранном масштабе даже не просматривается. Видна область и величина завышенных значений энергии, определяемых дебаевской теорией в сравнении с ПБС и даже с приближением Ликальтера.

Обращаем внимание на то, что в дебаевском приближении (кривая *1*) плазменный фазовый переход существует, а уже в приближении Ликальтера и тем более в ПБС его нет, а ведь разница между ними не столь велика. Причина, по мнению авторов, очевидна – завышенное притяжение, предполагаемое дебаевской теорией.

На рис. 2 нанесены уникальные экспериментальные данные [28], полученные на подогреваемой ударной трубе, обработанные специальной методикой для выделения экспериментальной полосы, соответствующей изохоре паров цезия с удельным объемом $V = 200$ см^3/г. Там же нанесены результаты расчетов с использованием дебаевской теории и ПБС. Снова видим различие между этими расчетами и близость к эксперименту результатов ПБС.

На последующих рисунках приведены зависимости давления от удельного объема на ударных адиабатах Гюгонио и данные ранних экспериментов [29, 30]. На рис. 3 представлены адиабаты аргона, отличающиеся начальным давлением. Хорошо видно появление эффектов неидеальности. Рис. 3б иллюстрирует утверждение о завышенном притяжении в дебаевской модели. На рис. 3в при больших сжатиях (малый удельный объем $V < 4$) дебаевская модель приводит к потере устойчивости, что является предвестником плазменного фазового перехода. Параметр Γ в этих экспериментах достигает величин 2–4.

На рис. 4 нанесены аналогичные данные для ксенона. Общая картина приблизительно та же, но достигнутый уровень параметров неидеально-

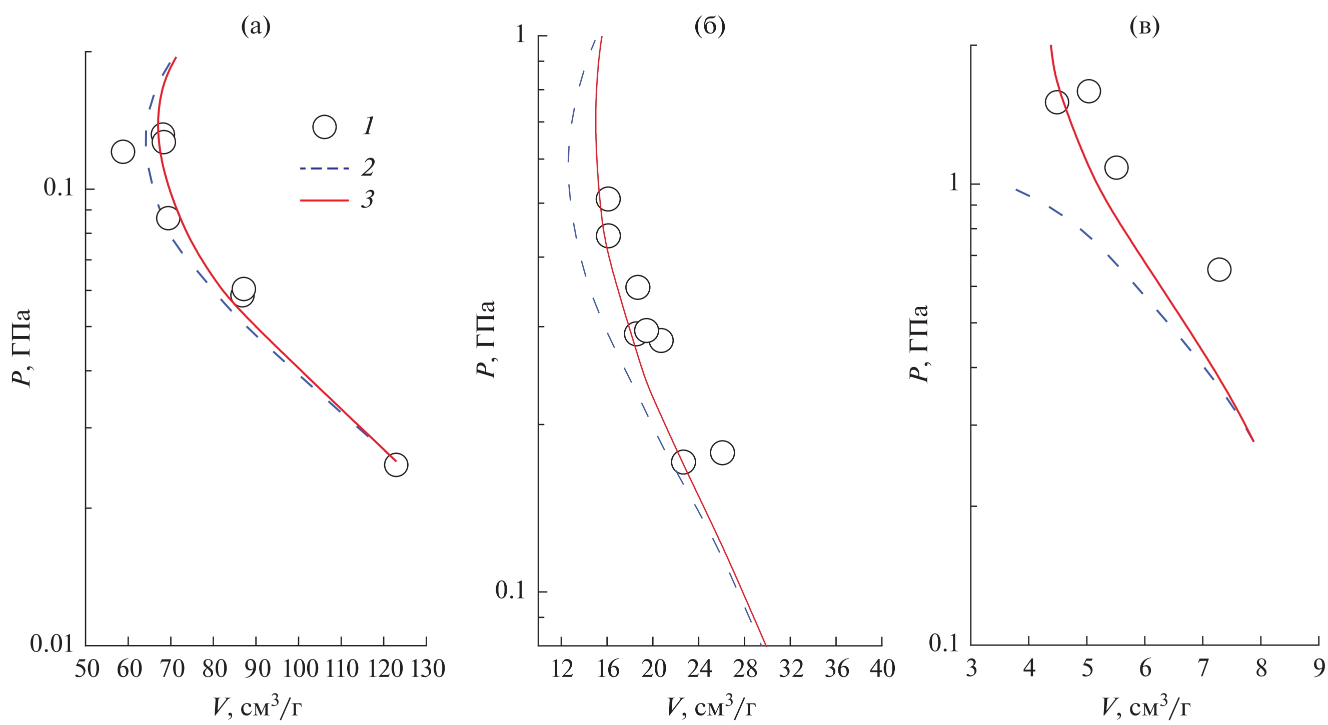


Рис. 3. Адиабата Гюгонио для аргона при $p_0 = 1$ (а), 5 (б) и 20 атм. (в): *1* – экспериментальные данные [29], *2* – дебаевское приближение, *3* – ПБС.

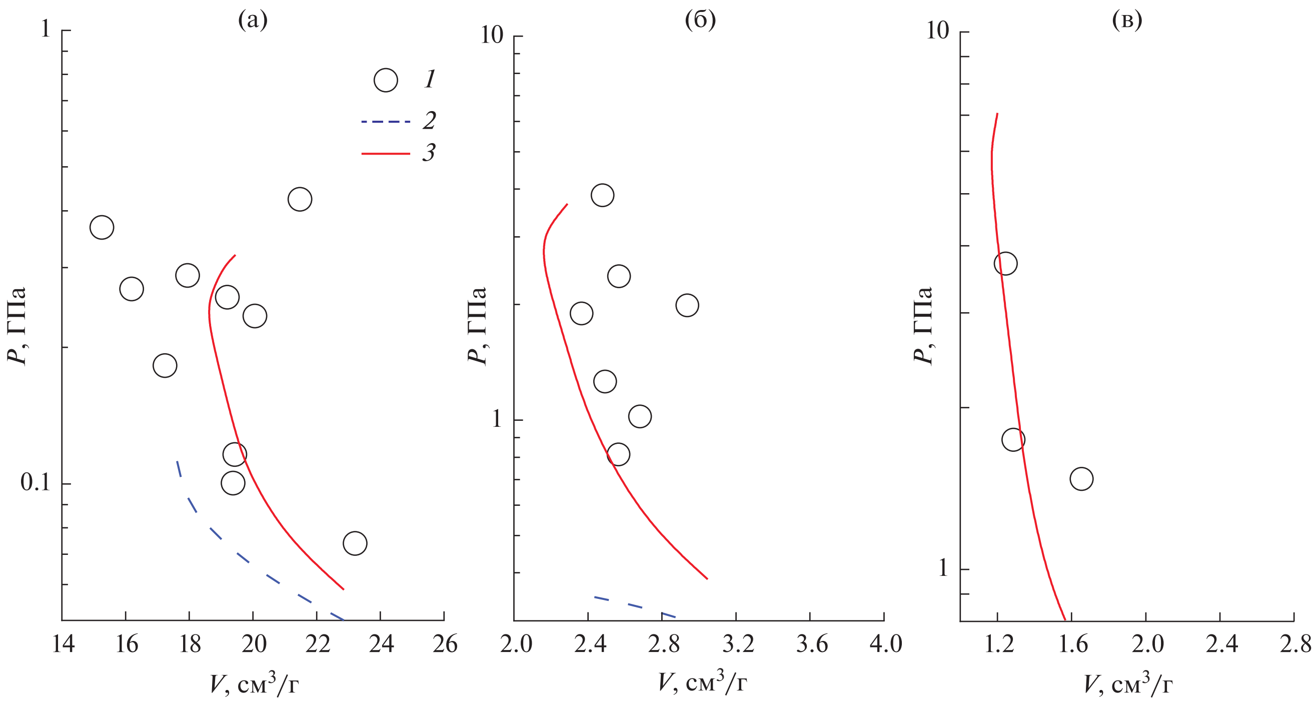


Рис. 4. Адиабата Гюгонио для ксенона при p_0 = 1 (а), 10 (б) и 20 атм. (в): *1* – экспериментальные данные [30], *2* – дебаевское приближение, *3* – ПБС.

сти выше и достигает пяти. На рис. 4в все расчеты в области рассмотренных удельных объемов по дебаевской модели не приводят к разумным результатам и дают отрицательные значения давления. Расчеты по ПБС показывают стабильные, устойчивые результаты, близкие к эксперименту во всей области. Следует отметить, что при высоких давлениях на адиабатах ксенона достигаются высокие температуры и заметную роль начинают играть эффекты, связанные со второй ионизацией, чего предлагаемая модель не учитывает.

Рекомендованные формулы для учета электрон-атомного, ион-атомного и атом-атомного взаимодействия широко использовались авторами ранее в серии химических моделей для плазмы паров металлов [31] и отдельно рассмотрены в [26].

Необходимые для конкретных расчетов констанды (I, E_A, α_D, C_{VdW} (C_6), D_{ia}, D_{aa}) можно найти в справочнике [32].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для построения достаточно простого и надежного варианта трехкомпонентной химической модели плазмы рассмотрены некоторые аспекты учета взаимодействий в химически реагирующей атомарной плазме. Основное внимание уделено кулоновской неидеальности, породившей самые многочисленные дискуссии. В результате предложен простой, но достаточно обоснованный вариант химической модели неидеальной атомарной плазмы, приемлемый “для пользователей”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Фортов В.Е., Храпак А.Г., Якубов И.Т.* Физика неидеальной плазмы. М.: Физматлит, 2010.
2. *Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Красников Ю.Г., Кузнецова Н.И., Кучеренко В.И., Лаппо Г.Б., Ломакин Б.Н., Павлов Г.А., Сон Э.Е., Фортов В.Е.* Теплофизические свойства рабочих сред газофазного ядерного реактора. М.: Атомиздат, 1980.
3. *Норман Г.Э., Старостин А.Н.* Термодинамика сильно неидеальной плазмы // ТВТ. 1970. Т. 8. № 2. С. 413.
4. *Saumon D., Schabrier G.* Fluid Hydrogen at High Density: Pressure Dissociation // Phys. Rev. A. 1991. V. 44. P. 5122.
5. *Saumon D., Chabrier G.* Fluid Hydrogen at High Density: Pressure Ionization // Phys. Rev. A. 1992. V. 46. P. 2084.
6. *Potekhin A.Y.* Ionization Equilibrium of Hot Hydrogen Plasma // Phys. Plasmas. 1996. V. 3. P. 4156.
7. *Juranek H., Redmer R.* Self-consistent Fluid Variational Theory for Pressure Dissociation in Dense Hydrogen // J. Chem. Phys. 2000. V. 112. № 8. P. 3780.
8. *Redmer R.* Electrical Conductivity of Dense Metal Plasmas // Phys. Rev. E. 1999. V. 59. P. 1073.
9. *Грязнов В.К., Жерноклетов М.В., Иосилевский И.Л., Симаков Г.В., Трунин Р.Ф., Трусов Л.И., Фортов В.Е.* Ударно-волновое сжатие сильнонеидеальной плазмы металлов и ее термодинамика // ЖЭТФ. 1998. Т. 114. Вып. 4(10). С. 1242.

10. *Фортов В.Е., Терновой В.Я., Жерноклетов М.В., Мочалов М.А., Михайлов А.Л., Филимонов А.С., Пяллинг А.А., Минцев В.Б., Грязнов В.К., Иосилевский И.Л.* Ионизация давлением неидеальной плазмы в мегабарном диапазоне динамических давлений // ЖЭТФ. 2003. Т. 124. С. 288.
11. *Аюков С.В., Батурин В.А., Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Старостин А.Н., Фортов В.Е.* Анализ малых примесей тяжелых элементов в солнечной плазме с помощью уравнения состояния SAHA-S // Письма в ЖЭТФ. 2004. Т. 80. № 3. С. 163.
12. Очерки физики и химии низкотемпературной плазмы / Под ред. Полака Л.С. М.: Наука, 1971.
13. *Веденов А.А., Ларкин А.И.* Уравнение состояния плазмы // ЖЭТФ. 1959. Т. 36. С. 1139.
14. *Семенов А.М.* Расчет термодинамических свойств пара натрия из первых принципов // ДАН СССР. 1984. Т. 278. № 4. С. 866.
15. *Ebeling W., Richert W., Kraeft W.D., Stolzman W.* Padé Approximations for the Thermodynamic Functions of Weakly Interacting Coulombic Quantum Systems // Phys. Stat. Sol. 1981. V. 104. P. 193.
16. *Ebeling W., Richert W.* Plasma Phase Transition in Hydrogen // Phys. Lett. 1985. V. 108A. P. 80.
17. *Gell-Mann M., Brueckner K.A.* Correlation Energy of an Electron Gas at High Density // Phys. Rev. 1957. V. 106. P. 364.
18. *Хомкин А.Л., Шумихин А.С.* Переход от газокинетической к минимальной металлической проводимости в сверхкритическом флюиде паров металлов // ЖЭТФ. 2017. Т. 151. С. 1169.
19. *Хомкин А.Л., Муленко И.А.* Свободная энергия неидеальной атомарной плазмы // ТВТ. 2003. Т. 41. № 3. С. 327.
20. *Муленко И.А., Хомкин А.Л., Шумихин А.С.* Базовые химические модели неидеальной атомарной плазмы // ТВТ. 2004. Т. 42. № 6. С. 835.
21. *Ликальтер А.А.* Взаимодействие атомов с электронами и ионами в плазме // ЖЭТФ. 1969. Т. 56. С. 240.
22. *Грязнов В.К.* Термодинамика низкотемпературной плазмы в квазихимическом представлении // Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Вводн. т. I. М.: Наука, 2000. С. 299.
23. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. М.: Наука, 1976.
24. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1974.
25. *Хилл Т.* Статистическая механика. М.: Изд-во иностр. лит., 1960.
26. *Хомкин А.Л., Шумихин А.С.* Особенности учета атом-атомного и ион-атомного взаимодействия в газах при наличии процессов диссоциации // ТВТ. 2019. Т. 57. № 1. С. 4.
27. *Муленко И.А., Соловей В.Б., Хомкин А.Л., Цуркин В.Н.* О температурной зависимости вириальных коэффициентов в химически реагирующих системах // ТВТ. 1999. Т. 37. № 3. С. 518.
28. *Бушман А.В., Ломакин Б.А., Сеченов А.В., Фортов В.Е., Щекотов О.Е., Шариджанов И.И.* Термодинамика неидеальной плазмы цезия // ЖЭТФ. 1975. Т. 69. № 5. С. 1624.
29. *Фортов В.Е., Леонтьев А.А., Дремин А.Н., Грязнов В.К.* Генерация неидеальной плазмы ударными волнами // ЖЭТФ. 1976. Т. 71. № 1. С. 225.
30. *Грязнов В.К., Жерноклетов М.В., Зубарев В.Н., Иосилевский И.Л., Фортов В.Е.* Термодинамические свойства неидеальной плазмы аргона и ксенона // ЖЭТФ. 1980. Т. 78. № 2. С. 573.
31. *Хомкин А.Л., Шумихин А.С.* Уравнение состояния, состав и проводимость плазмы паров металлов // ТВТ. 2014. Т. 52. № 3. С. 335.
32. *Радциг А.А., Смирнов Б.М.* Справочник по атомной и молекулярной физике. М.: Атомиздат, 1980.

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР, 2021, том 59, № 1, с. 12–21

УДК 533.922

РАЗРАБОТКА КИНЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПЛАЗМЫ СВЧ-РАЗРЯДА В РЕЖИМЕ ЭЛЕКТРОННО-ЦИКЛОТРОННОГО РЕЗОНАНСА С УЧЕТОМ ВРЕМЕННО́Й ЭВОЛЮЦИИ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ

© 2021 г. Д. С. Степанов[1, *], Э. Я. Школьников[1]

[1] *Национальный исследовательский ядерный университет "Московский инженерно-физический институт", Москва, Россия*

**E-mail: DSStepanov@mephi.ru*

Поступила в редакцию 26.03.2020 г.
После доработки 18.06.2020 г.
Принята к публикации 18.06.2020 г.

Разработана программа моделирования кинетики газового разряда с учетом временно́й эволюции функции распределения электронов по энергиям на примере СВЧ-разряда в режиме электронно-циклотронного резонанса в молекулярном дейтерии. Модель включает в себя усредненное нагревающее действие СВЧ-поля при циклотронном резонансе, упругие соударения электронов с электронами и тяжелыми компонентами разряда, а также неупругие реакции возбуждения и превращения. Программа учитывает временну́ю эволюцию функции распределения электронов под действием указанных процессов, для чего разработан алгоритм, изменяющий границы расчетного диапазона функции распределения в зависимости от ее текущих значений, что позволяет рассматривать ее изменения в широком энергетическом диапазоне. Выработаны условия, определяющие точность работы данного алгоритма, и приведена динамика погрешности счета при вариации параметров этих условий. Показана адекватность и достоверность получаемых в модели результатов, оцененная как по величинам вносимых погрешностей, так и при сравнении со сторонними моделями.

DOI: 10.31857/S0040364421010142

ВВЕДЕНИЕ

Определение динамики протекания кинетических процессов в плазме газового разряда является действенным инструментом при разработке различных плазменных приборов, таких как газоразрядные лазеры, ионные источники и пр. Для этого могут использоваться математические модели различной степени сложности, включающие в себя те или иные приближения, выбор между которыми зависит от условий каждой конкретной задачи. Самый простой метод анализа кинетики газового разряда заключается в рассмотрении системы дифференциальных уравнений относительно концентрации плазменных компонент в приближении локального термодинамического равновесия и при постоянных температурах этих компонент [1]. Такая модель дает возможность оценить скорость развития разряда, его состав, а также значения кинетических коэффициентов, но ее применимость серьезно ограничена первоначальными приближениями. Следующим шагом на пути усложнения расчета газоразрядной кинетики является учет заселенности энергетических уровней рабочего газа [2–4]. Такие модели используются при разработке газовых лазеров, интерпретации спектроскопических исследований и пр. Основное ограничение в применении этих моделей связано с использованием постоянных значений концентрации или температуры электронной компоненты плазмы, иными словами, в квазистационарном приближении. Встречаются также и более сложные варианты моделирования заселенности энергетических уровней, учитывающие функцию распределения (ФР) электронов по энергиям. Тем не менее уравнение Больцмана в них решается также в условии стационара [5, 6]. Нестационарное решение уравнения Больцмана встречается в работах [7–10], где оно используется для исследования заселенности энергетических уровней газа, а также для рассмотрения процесса релаксации плазмы после окончания разряда. Данные модели применяются в областях, посвященных газовым лазерам, медицинским генераторам плазмы, системам поджига и пр. Однако оставление за рамками моделей процессов нагрева заряженных частиц электромагнитными полями, передачи энергии между компонентами плазмы, а также их превращений все еще не позволяет в полной мере исследовать переходные процессы в плазме газового разряда.

Создание математической модели, способной учитывать перечисленные выше процессы вместе с решением той или иной кинетической схемы, расширит возможности теоретического исследования различных газовых разрядов. Несмотря на общий характер поставленной задачи, она посвящена вполне конкретной проблеме описания развития СВЧ-разряда, зажигаемого в дейтерии в режиме электронно-циклотронного резонанса (ЭЦР) [11, 12], что сводит общий механизм взаимодействия электрического поля с компонентами плазмы к вполне конкретному, описанному там же. Таким образом, представленная авторами разработка программы математического моделирования кинетики плазмы газового разряда с учетом временно́й эволюции ФР электронов по энергиям будет проводиться на примере СВЧ-разряда в дейтериевом газе в режиме ЭЦР. По этой же причине здесь пока не требуется рассмотрение заселенности различных энергетических уровней атомов и молекул разряда.

ФИЗИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

В общем случае для описания динамики развития газового разряда необходимо совместно решить систему кинетических уравнений, составленных для каждой из его компонент $i = 1, 2, ..., k$ [13]:

$$\frac{\delta f_i(t,\mathbf{r},\mathbf{p})}{\delta t} + \frac{\delta}{\delta x_\alpha}\left(v_\alpha f_i(t,\mathbf{r},\mathbf{p})\right) + \mathbf{F}\frac{\delta f_i(t,\mathbf{r},\mathbf{p})}{\delta \mathbf{p}} = = Stf_i(t,\mathbf{r},\mathbf{p}), \quad (1)$$

где $f_i(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$ – ФР соответствующей компоненты разряда, $\mathbf{F}$ – внешняя сила, $Stf_i(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$ – интеграл столкновений, k – общее число компонент.

Однако решение подобной системы является весьма нетривиальной задачей, к тому же получаемая при этом информация зачастую избыточна. В этом случае следует переходить от общей ФР к зависимости только от обобщенного импульса, заменяя усредненную часть макроскопическими уравнениями относительно концентрации, в результате чего система (1) преобразуется следующим образом:

$$\begin{gathered}\frac{\delta f_i(t,\mathbf{p})}{\delta t} + \mathbf{F}\frac{\delta f_i(t,\mathbf{p})}{\delta \mathbf{p}} = Stf_i(t,\mathbf{rp}),\\ \frac{\delta n_i(t,\mathbf{r})}{\delta t} + \operatorname{div}\left(n_i(t,\mathbf{r})\mathbf{v}_i(\mathbf{r})\right) = N_i(t,\mathbf{r}),\end{gathered} \quad (2)$$

где $N_i(t, \mathbf{r})$ – функция, определяющая изменение соответствующей концентрации.

При использовании системы уравнений (2) для описания динамики плазмы избыточным можно считать и представление ее тяжелых компонент в форме ФР. Дело в том, что электроны в разряде являются наиболее активной составляющей, которая интенсивнее взаимодействует как с электромагнитными полями, так и с тяжелыми частицами, и именно электроны преимущественно определяют эволюцию состояний плазмы. Таким образом, при ее описании целесообразно оставлять уравнение относительно ФР по обобщенным импульсам только для электронной компоненты, а для тяжелых компонент – преобразовывать относительно величины средней энергии (температуры):

$$\begin{gathered}\frac{\delta f_e(t,\mathbf{p})}{\delta t} + \mathbf{F}\frac{\delta f_e(t,\mathbf{p})}{\delta \mathbf{p}} = Stf_e(t,\mathbf{rp}),\\ \frac{\delta n_e(t,\mathbf{r})}{\delta t} + \operatorname{div}\left(n_e(t,\mathbf{r})\mathbf{v}_e(\mathbf{r})\right) = N_e(t,\mathbf{r}),\\ \frac{\delta w_i(t)}{\delta t} = W_i(t),\\ \frac{\delta n_i(t,\mathbf{r})}{\delta t} + \operatorname{div}\left(n_i(t,\mathbf{r})\mathbf{v}_i(\mathbf{r})\right) = N_i(t,\mathbf{r}),\end{gathered} \quad (3)$$

где $w_i(t)$ – средняя энергия (температура) тяжелой компоненты, $W_i(t)$ – скорость изменения ее энергии.

Переходя к рассматриваемому в данной работе СВЧ-разряду с ЭЦР, приходится использовать нульмерную геометрию, что обусловлено ограничением доступных вычислительных мощностей и заключается в переходе от ФР электронов по компонентам обобщенного импульса к распределению по энергии, а также к исключению пространственной зависимости для концентрации и средней энергии компонент разряда. Далее необходимо определить вид фигурирующих в (3) функций $St_ef(t, E)$, $N_i(t)$, $W_i(t)$ и $\mathbf{F}\dfrac{\delta f_e(t,\mathbf{p})}{\delta \mathbf{p}}$.

Интеграл столкновений $St_ef(t, E)$ складывается из трех слагаемых, отвечающих соответственно упругим соударениям между электронами, упругим соударениям электронов с тяжелыми частицами, а также неупругим взаимодействиям. В [13] дано общее выражение для интеграла столкновений, подразумевающее описание обеих взаимодействующих компонент через их функции распределения. Так как в текущей задаче этому условию удовлетворяют только упругие соударения электронов между собой, то соответствующий вид имеет лишь это слагаемое:

$$\begin{gathered}St_{ee}f_e(t,E) = \int\left[f_e\left(E'(E,E_t)\right)f_e(E_t) - \right.\\ \left. - f_e(E)f_e(E_t)\right]v_{ee}\sigma_{ee}(E_{ee})n_e dE_t.\end{gathered} \quad (4)$$

Здесь E – энергия налетающего электрона; E_t – энергия электрона-мишени; $E'(E, E_t)$ – энергия, которой должен обладать налетающий электрон, чтобы при его столкновении с электроном-мишенью получился электрон с энергией E; v_{ee} – относительная скорость сталкивающихся электронов; E_{ee} – соответствующая этому энергия; $\sigma_{ee}(E_{ee})$ –

сечение упругого рассеяния (в данном случае — кулоновское). Функция $E'(E, E_t)$ определяется на основе законов сохранения импульса и энергии. В силу положенного ранее отсутствия в задаче каких-либо пространственных измерений, решение должно быть сведено к скалярным величинам кинетической энергии частиц, что осуществимо посредством усреднения по всем возможным начальным углам, а также углам рассеяния. Получаемая таким образом зависимость не включает в себя рассеянные частицы с относительной энергией E/E_t, меньшей 0.3, что делает множество этих энергий ограниченным снизу и, как следствие, не дает ФР термализоваться. Недостающие здесь значения определяются множеством углов, на которые частицы могли быть рассеяны, но в используемом приближении эти углы сняты, а значит, упомянутая неточность обязана появляться. В этой связи необходимо выбирать функцию $E'(E, E_t)$ исходя из ее способности термализовать любую начальную ФР. На рис. 1 показана удовлетворяющая указанному условию функция $E'(E, E_t)$ и результат ее воздействия на ступенчатую в интервале от 0 до 7 эВ ФР. Время релаксации ФР обозначено как τ_{ee}.

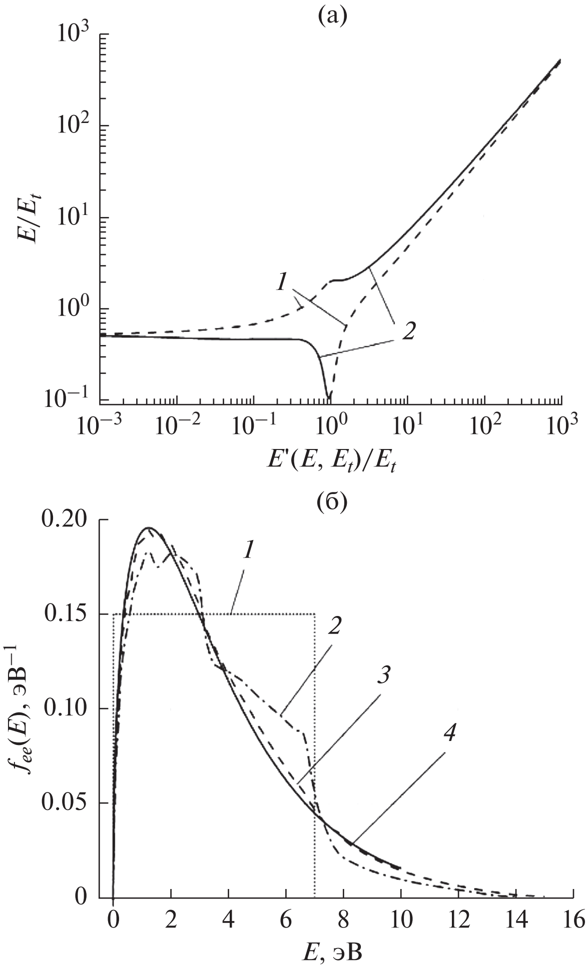


Рис. 1. Описание упругих соударений электронов: (а) — перераспределение суммарной энергии между двумя рассеянными частицами (*1* и *2*), (б) — этапы релаксации ступенчатой ФР: *1* — начальная ФР, *2* — спустя τ_{ee}, *3* — спустя $3\tau_{ee}$, *4* — ФР Максвелла.

Следующее слагаемое в интеграле столкновений отвечает упругим соударениям электрона с тяжелыми частицами, ФР которых принята в виде δ-функции относительно их средней энергии (температуры). Взятие интеграла в (4) по такой ФР приводит к следующему виду второго слагаемого интеграла столкновений:

$$St_{ei\ \mathrm{el}} f_e(t, E) = \\ = \sum_{j=1}^{4} \left[f_e\left(E'_{ej}(E, w_j)\right) - f_e(E) \right] \nu_{ej} \sigma_{ej}(E_{ej}) n_j. \quad (5)$$

Здесь j = 1–4 отвечает атому, молекуле, атомарному иону и молекулярному иону дейтерия соответственно; функция $E'_{ej}(E, w_j) = E + E_{ej} m_e/M_j$, знак "+" в которой обусловлен тем обстоятельством, что энергия электронов принята большей энергии тяжелой компоненты. Последнее слагаемое интеграла столкновений учитывает неупругие взаимодействия электронов с остальными частицами разряда и в целом имеет вид, аналогичный (5). Его особенность заключается в том, что наряду с реакциями, приводящими к потере электронами энергии (запись которых целиком повторяет (5)), существуют реакции, при которых образуются новые электроны, что требует введения в (5) нового члена. Таким образом, выражение для интеграла неупругих столкновений принимает следующий вид:

$$St_{ei\ \mathrm{inel}} f_e(t, E) = \sum_{j=1}^{M} \left[f_e\left(E + E'_j\right) - f_e(E) \right] \times \\ \times \nu_{ej} \sigma_j(E_{ej}) n_j + \sum_{j=1}^{L} \left[f_e\left(E'_{j1}(E)\right) + \\ + f_e\left(E'_{j2}(E)\right) - f_e(E) \right] \nu_{ej} \sigma_j(E_{ej}) n_j, \quad (6)$$

где M — число неупругих реакций, при которых не появляются новые электроны (возбуждение, диссоциация); L — число неупругих реакций, при которых появляются новые электроны (ионизация, диссоциативная ионизация); E'_j — потери энергии электроном в j-й реакции; $E'_{j1}(E)$ — энергия электрона, который после неупругого взаимодействия остается с энергией E; $E'_{j2}(E)$ — энергия электрона, после неупругого соударения которого появляется электрон с энергией E; n_j – концентрация тяжелой компоненты, соответствующей j-й реакции. Неопределенными остаются функции $E'_{j1}(E)$ и $E'_{j2}(E)$, которые отвечают за перераспределение энергии первичного электрона (за вычетом энергии ионизации) между рассеянным и образовавшимся электронами (в приближении малого изменения импульса тяжелой частицы). Энергия нового электрона определяется в зависимости от соотношения между энергией налетающего электрона E_1 и потенциалом ионизации I. При ионизации дейтерия электроном с энергией ≤200 эВ расчет переданной образовавшемуся электрону энергии осуществляется в соответствии с [14, 15] следующей формулой:

$$E_2 = B(E_1)\mathrm{tg}\left(\chi \mathrm{arctg}\left(\frac{E_1 - I}{2B(E_1)}\right)\right).$$

Здесь E_2 – энергия образовавшегося электрона; $B(E_1)$ – слабо меняющаяся функция, равная, например, для дейтерия ≈8.3 эВ в рассматриваемом диапазоне энергий; χ – равномерно распределенная случайная величина в диапазоне от 0 до 1. В обратном случае, при энергии первичного электрона более 200 эВ ионизацию можно рассматривать как рассеяние на свободном электроне, в результате чего потеря энергии первичного электрона рассчитывается посредством решения уравнения относительно доли этой энергии η [16, 17]:

$$\int_{\eta_0}^{\eta}\left(\frac{1}{x^2} - \frac{1}{x(1-x)}\frac{(2C_1+1)}{(C_1+1)^2} + \frac{1}{(1-x)^2} + \frac{C_1^2}{(C_1+1)^2}\right)dx = \\ = \chi\left(\frac{1}{\eta_0} - \frac{1}{(1-\eta_0)} + \frac{C_1^2(0.5-\eta_0)}{(C_1+1)^2} - \frac{2C_1+1}{(C_1+1)}\right),$$

где $C_1 = E_1/(m_e c^2)$ – энергия электрона в единицах массы покоя, c – скорость света, $\eta_0 = I/E_1$ – минимальное значение η.

Выражение для изменения концентрации компонента разряда $N_i(t)$ следует из уравнения (6), которое определяет количество актов соответствующего взаимодействия, приходящееся на единичный электрон с энергией E. Таким образом, для получения скорости изменения концентрации реагентов или продуктов реакции необходимо проинтегрировать соответствующие слагаемые из (6) по энергии электрона E, после чего умножить полученные интегралы на концентрацию электронов n_e и сложить их:

$$N_i(t) = \sum_{j=1}^{G_i}\int f_e(E) v_{ej}\sigma_j(E_{ej}) n_j n_e dE, \qquad (7)$$

где G_i – количество реакций, в которых участвует i-й компонент.

Аналогичным образом величина $W_i(t)$ определяется из (5). Для этого необходимо перейти от выраженной в (5) частоты взаимодействия единичного электрона с ансамблем тяжелых частиц, к частоте взаимодействия единичной тяжелой частицы с ансамблем электронов, что происходит заменой n_j на n_e и обусловлено представлением тяжелой компоненты через среднюю энергию. Последующее умножение полученной частоты на передаваемую при упругом соударении энергию и интегрирование по всей ФР электронов даст скорость изменения энергии тяжелой компоненты:

$$W_i(t) = \int f_e(E) v_{ej}\sigma_j(E_{ej}) E_{ej}(m_e/M_i) n_e dE. \qquad (8)$$

Последней неописанной составляющей системы уравнений (3) является взаимодействие электронов с электромагнитным полем. В общем случае и на языке ФР оно выглядело бы следующим образом. Под действием переменного электрического поля ФР электронов испытывает осцилляции в соответствии с частотой поля и амплитудой, отвечающей его напряженности. В присутствии внешнего магнитного поля амплитуда этих осцилляций может значительно возрастать, что регулируется близостью частоты поля к циклотронному резонансу, а вращение электронов в магнитном поле отражается в ФР как перераспределение ее значений между различными пространственными компонентами. Происходящие при этом упругие соударения электронов с тяжелыми частицами переводят энергию направленного движения вдоль электрического поля к хаотическому тепловому движению. В результате эволюция ФР электронов выглядит как ее общее движение по направлению роста энергии, на которое накладываются высокочастотные осцилляции и периодическое перераспределение энергии между пространственными компонентами. Рассматриваемый здесь ЭЦР осуществляется при частоте электромагнитного СВЧ-поля 2.45 ГГц, что определяет период упомянутых выше осцилляций как 0.4 нс, откуда вытекает необходимость использования временнóй дискретизации не выше 10^{-3} нс. Принимая во внимание характерное время развития разряда ~10^5 нс реализация подобного механизма взаимодействия электромагнитного поля с ФР электронов оказывается неосуществимой в силу ограниченных возможностей вычислительной техники. В этой связи необходимо использовать упрощенную модель этого взаимодействия, например модель из [11]. В ней описывается колебательное движение электрона в скрещенных переменном электрическом и постоянном магнитном полях и сопровождающая это хаотизация кинетической энергии направленного движения электронов вследствие упругих соударений с тяжелыми компонентами плазмы, посредством которой электроны плазмы и поглощают энергию поля. В итоге получается скалярное выражение для силы, действие которой с точки зрения передачи энергии электронам в среднем эквивалентно полному действию электромагнитной волны в присутствии внешнего магнитного поля:

$$F = \frac{eE_0^2\nu}{2m_e\left(\omega^2+\nu^2\right)}\gamma(\omega,\omega_L,\nu),$$
$$\gamma(\omega,\omega_L,\nu) = \frac{\left(1+\omega_L^2/\omega^2+\nu^2/\omega^2\right)\left(1+\nu^2/\omega^2\right)}{\left(1-\omega_L^2/\omega^2-\nu^2/\omega^2\right)+4\nu^2/\omega^2}, \tag{9}$$

где E_0 – амплитуда напряженности электрического поля, ω – его частота, ω_L – ларморовская частота электрона, ν – эффективная частота упругих соударений электрона с тяжелыми частицами, v_e – скорость электрона, $\gamma(\omega, \omega_L, \nu)$ – резонансный коэффициент, характеризующий усиление поглощения энергии электронами в присутствии внешнего магнитного поля ($\gamma = 1$ в его отсутствие). Приведение этого выражения к виду, используемому при записи уравнения Больцмана, дает следующую формулу:

$$\mathbf{F}\frac{\delta f_e(t,\mathbf{p})}{\delta\mathbf{p}} = $$
$$= -\frac{eE_0^2\nu}{2m_e\left(\omega^2+\nu^2\right)}\gamma(\omega,\omega_L,\nu)\frac{\delta f_e}{\delta E} = St_{\text{heat}}. \tag{10}$$

Объединяя вместе все выражения (3)–(10), получим финальную систему уравнений, которую необходимо решить для моделирования кинетики плазмы газового разряда с учетом временнóй эволюции ФР электронов по энергии на примере СВЧ-разряда в дейтериевом газе и в присутствии ЭЦР ($i = 1, 2, 3, 4$):

$$\begin{gathered}
\frac{\delta f_e(t,E)}{\delta t} = \frac{eE_0^2\nu}{2m_e\left(\omega^2+\nu^2\right)}\gamma(\omega,\omega_L,\nu)\frac{\delta f_e}{\delta E} + \\
+\int\left[f_e\left(E'(E,E_t)\right)f_e(E_t) - f_e(E)f_e(E_t)\right]\times \\
\times\nu_{ee}\sigma_{ee}(E_{ee})n_e dE_t + \sum_{j=1}^{4}\left[f_e\left(E'_{ej}(E,w_j)\right) - f_e(E)\right]\times \\
\times\nu_{ej}\sigma_{ej}(E_{ej})n_j + \sum_{j=1}^{M}\left[f_e\left(E+E'_j\right) - f_e(E)\right]\times \\
\times\nu_{ej}\sigma_{ej}(E_{ej})n_j + \\
+\sum_{j=1}^{L}\left[f_e\left(E'_{j1}(E)\right) + f_e\left(E'_{j2}(E)\right) - f_e(E)\right]\times \\
\times\nu_{ej}\sigma_{ej}(E_{ej})n_j, \\
\frac{\delta n_e(t)}{\delta t} = \sum_{j=1}^{G_e}\int f_e(E)\nu_{ej}\sigma_j(E_{ej})n_j n_e dE, \\
\frac{\delta w_i(t)}{\delta t} = \int f_e(E)\nu_{ei}\sigma_j(E_{ei})E_{ei}(m_e/M_i)n_e dE, \\
\frac{\delta n_i(t)}{\delta t} = \sum_{j=1}^{Gi}\int f_e(E)\nu_{ei}\sigma_j(E_{ei})n_i n_e dE,
\end{gathered} \tag{11}$$

АЛГОРИТМ

Численное решение системы уравнений (11) осуществляется неявным методом Адамса–Мултона с переменным шагом и порядком интегрирования [18], реализованным в коде Fortran с использованием параллельных вычислений посредством OpenMP. Интегрированию подвергается система из $NF + NC + NC - 1$ уравнений, где NF – число точек, на которые разбита ФР, NC – число компонент разряда (уравнений для их концентраций), а $NC - 1$ – число уравнений для средних энергий тяжелых компонент. Для рассматриваемого разряда $NC = 5$. Дифференциальные уравнения обыкновенно решаются на фиксированной области определения искомой функции, в то время как присутствие в задаче нагрева электронов и их упругих соударений между собой приводит к изменению размеров этой области, что можно наблюдать на примере релаксации ступенчатой ФР на рис. 1б. Таким образом, должны быть сформулированы условия, в соответствии с которыми алгоритм интегрирования будет изменять границы области определения, что при неизменной величине NF означает управление начальным значением энергии E_0 и шагом между точками, в которых рассчитывается ФР. При ее расширении значения в новых точках вычисляются с помощью экстраполяции. Эти новые значения существенно влияют на шаг интегрирования, так как он определяется своим минимумом среди всех уравнений системы. Чем больше различие между значениями внутри массивов значений функций $f_e(E)$ и $Stf_e(E)$, тем сильнее шаг интегрирования по времени не соответствует большей части решаемых уравнений, а общая скорость решения задачи уменьшается. Отсюда следует, что управляющее областью определения ФР условие должно удовлетворять заданной кратности отношения максимального к минимальному значению функций $f_e(E)$ и $Stf_e(E)$ соответственно K_f и K_{St}. Эти величины определяют полноту рассмотрения эволюции ФР, и от них зависит как точность решения кинетического уравнения, так и затрачиваемое на это время, а вместе с ним и возможность осуществления решения как такового.

Управление областью определения ФР подразумевает не только ее расширение при превышении значения $f_e(E_{\max})$ или $Stf_e(E_{\max})$ над величинами $f_{e\max}/K_f$ или $St_{\max}f_e/K_{St}$ соответственно, но и сжатие этой области в обратной ситуации, которая возникает на левой границе ФР при ее нагреве (перемещении вправо). В этом случае значение величины E_0 становится отличным от нуля и образуется диапазон энергии между 0 и E_0, в котором ФР положена равной нулю. При этом соударения электронов могут приводить к ее обратному распространению на эту область, причем необязательно вблизи E_0, что обусловлено неупругим взаимодействием. В этой связи необходимо вычислять значения $Stf_e(E)$ за пределами области определения ФР и на каждом шаге интегрирования проводить проверку посредством K_{St} на предмет расширения. Количество точек, на которых это происходит, является параметром решения задачи и равняется NF_0 для левой границы области определения и $NF_{\max}$ – для правой.

Удаление значений функций $f_e(E)$ и $Stf_e(E)$ вносит погрешности в решение уравнения Больцмана, которые должны быть малы и несущественны. В этой связи за их количественным выражением необходимо следить, равно как и за степенью выполнения законов сохранения массы и энергии. Удовлетворяющей обоим этим положениям мерой могут послужить интегралы величин $f_e(E)$ и $Stf_e(E)$, а также $f_e(E)E$ и $Stf_e(E)E$ по соответствующим областям определений и их прямые отношения. Так, например, оценка погрешности, вносимой устранением недостаточно высоких значений $Stf_e(E)$, осуществляется с помощью следующих выражений:

$$I_{St^-} = \int_{E_0-NF_0\Delta E}^{E_0} |Stf_e(E)|\,dE,$$

$$I_{St^+} = \int_{E_0+NF\Delta E}^{E_0+NF\Delta E+NF_{\max}\Delta E} |Stf_e(E)|\,dE,$$

$$I_{St^0} = \int_{E_0}^{E_0+NF\Delta E} |Stf_e(E)|\,dE,\quad \delta_{St} = \frac{I_{St^-}+I_{St^+}}{I_{St^0}},$$

$$I_{StE^-} = \int_{E_0-NF_0\Delta E}^{E_0} |Stf_e(E)|\,dE,$$

$$I_{StE^+} = \int_{E_0+NF\Delta E}^{E_0+NF\Delta E+NF_{\max}\Delta E} |Stf_e(E)|\,dE,$$

$$I_{StE^0} = \int_{E_0}^{E_0+NF\Delta E} |Stf_e(E)|\,dE,\quad \delta_{StE} = \frac{I_{StE^-}+I_{StE^+}}{I_{StE^0}},$$

где I_{St^-} и I_{St^+} – интегральные изменения ФР электронов, которые должны происходить на выведенных из рассмотрения областях энергии; I_{St^0} – интегральное изменение ФР электронов, учитываемое при решении; I_{StE^-}, I_{StE^+} и I_{StE^0} – аналогичные величины для изменения энергии электронов; δ_{St} и δ_{StE} – величины соответствующих погрешностей.

Таким же образом оцениваются δ_f и δ_{fE} – погрешности функции $f_e(E)$, с той лишь разницей, что у нее нет значений за пределами области определения. Однако после каждого шага интегрирования они могут изменяться таким образом, что часть их должна быть удалена или добавлена, а сама $f_e(E)$ переопределена на новые границы.

Алгоритм решения кинетического уравнения Больцмана представлен в форме блок-схемы на рис. 2. В первую очередь вводятся необходимые начальные данные, такие как параметры СВЧ-поля, сечения рассматриваемых процессов, стартовые значения для концентраций компонентов разряда, их средних энергий и температуры первичной ФР электронов, а также численные параметры решения, среди которых не обозначены еще два: $t_{\max}$ – максимальное время моделирования и ε – точность интегрирования. Далее вычисляются части интеграла столкновений $Stf_e(E)$, отвечающие нагреву, упругим и неупругим соударениям. Из них определяется передаваемая тяжелым компонентам разряда энергия W, а также скорость изменения концентраций N этих компонент и электронов. Полученные здесь величины поступают в блок интегрирования, где вычисляются ФР, концентрации и средние энергии частиц плазмы в следующий момент времени. При этом интеграл столкновений проходит проверку на отсутствие достаточно больших значений за пределами области определения $f_e(E)$. Отрицательный исход этой проверки запускает механизм переопределения параметров энергетического разбиения ФР E_0, ΔE, а вместе с ним и самих функций $Stf_e(E)$ и $f_e(E)$. В любом случае не вошедшие в решение значения интеграла столкновений записываются в погрешность δ_{St} и δ_{StE}. Непосредственно перед интегрированием осуществляется фильтрование значений $Stf_e(E)$ от численных шумов (см. рис. 1б). После интегрирования проверяется выполнение условия нахождения крайних точек новой ФР точно на границе заданного диапазона между значениями $f_{\max}$ и $f_{\max}/K_f$. В случае невыполнения производится перерасчет f_e на энергетическое распределение с новыми параметрами, при которых требуемое условие выполняется. При этом удаленные или добавленные значения ФР приписываются величинам соответствующих погрешностей δ_f и δ_{fE}. Обе ветви указанной проверки завершаются нормировкой новой ФР на единицу. Наконец, новые значения функции распределения электронов f_e, концентраций n, средних энергий тяжелых компонент w в текущий момент времени t, а также погрешности δ выводятся вовне. После этого и в случае недостижимости максимального времени счета $t_{\max}$ или превышения концентрации молекулярного дейтерия $n_2(t)$ значения 1 см$^{-3}$ цикл повторяется. В противном случае программа завершает свою работу.

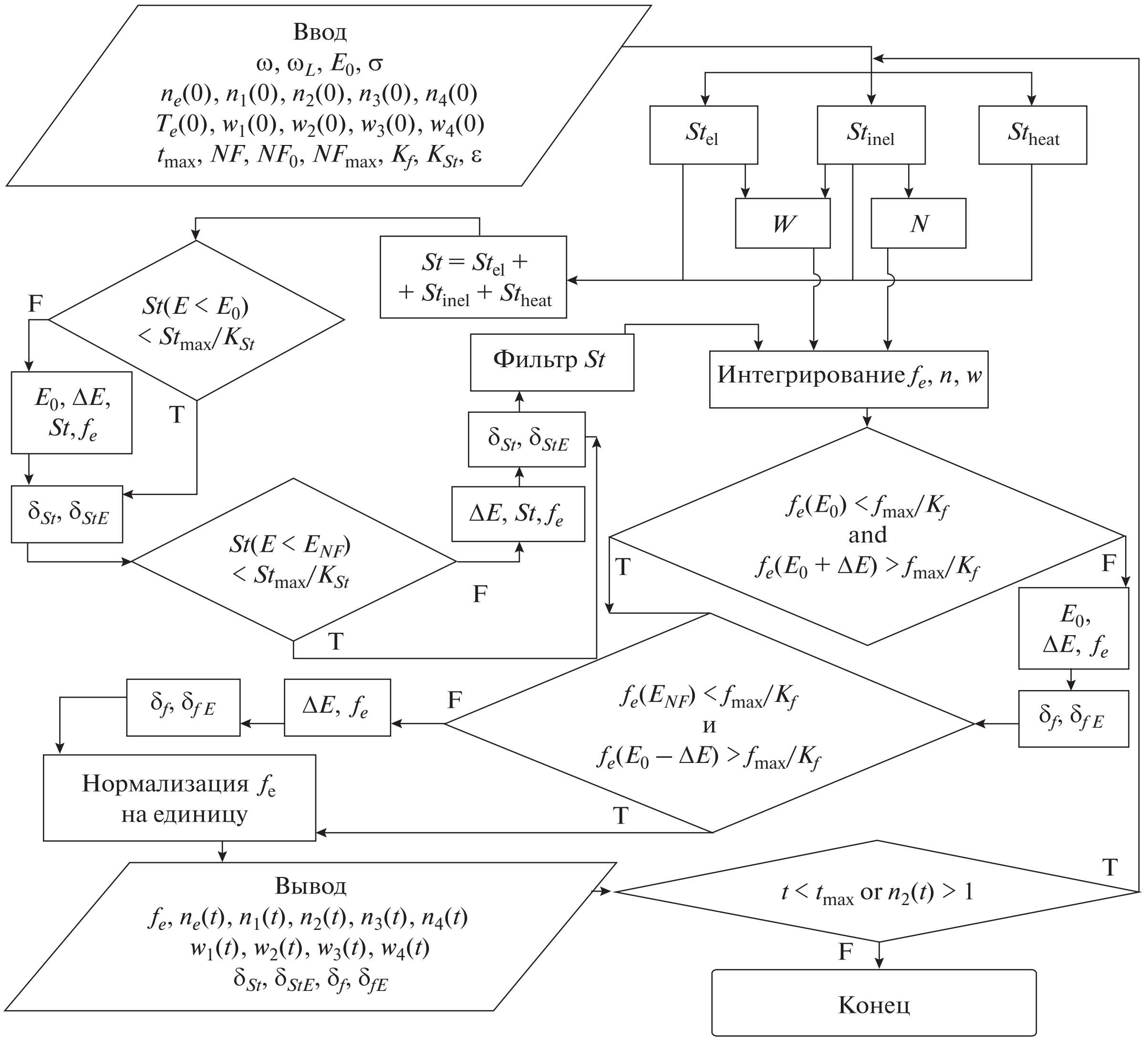


Рис. 2. Блок-схема решения кинетического уравнения Больцмана.

РЕЗУЛЬТАТЫ

Оценка работы алгоритма происходила при следующих параметрах СВЧ-разряда в режиме ЭЦР: $\omega = 15.4 \times 10^9$ с$^{-1}$, $\omega_L = 14.3 \times 10^9$ с$^{-1}$ (чему соответствуют $\gamma = 100$ и $B = 815$ Гс [11, 12]), $E_0 = 2 \times 10^4$ В/м, $n_e(0) = 10^5$ см$^{-3}$, $n_1(0) = 2 \times 10^{12}$ см$^{-3}$, $n_2(0) = 8 \times 10^{12}$ см$^{-3}$, $n_3(0) = 2 \times 10^4$ см$^{-3}$, $n_4(0) = 8 \times 10^4$ см$^{-3}$, $T_e(0) = 1$ эВ, $w_i(0) = 0.026$ эВ ($i = 1, 2, 3, 4$). Численные параметры модели принимали следующие значения: $t_{max} = 1$ с; $NF = NF_0 = NF_{max} = 101$, 201, 401; $K_f = K_{St} = 10$, 20, 30; $\varepsilon = 10^{-8}$. Для расчетов использовался процессор Intel Core i7 8700K с частотой 3.7 ГГц на 10 потоках. На рис. 3а представлена эволюция ФР электронов по энергии в течение небольшого промежутка времени, что демонстрирует успешное выполнение заложенных в программу механизмов регулирования области определения ФР. Корректность решения кинетической схемы разряда подтверждается динамикой концентрации его компонент, представленной на рис. 3б, которая качественно совпадает с результатами использования более простых моделей из [3, 11], а также демонстрирует количественное сходство между полученными временами развития разряда, которые исчисляются десятками микросекунд.

Первым численным параметром модели является количество точек, на которое разбивается область определения ФР. На рис. 4а представлена динамика погрешностей функций $f_e(E)$ и $Stf_e(E)$ с течением времени для различных значений $NF = NF_0 = NF_{max}$ и фиксированного $K_f = K_{St} = 20$. Сплошными линиями представлена сумма величин δ_{St} и δ_{StE}, измеряющих ошибку в законах сохранения вещества и энергии при удалении недо-

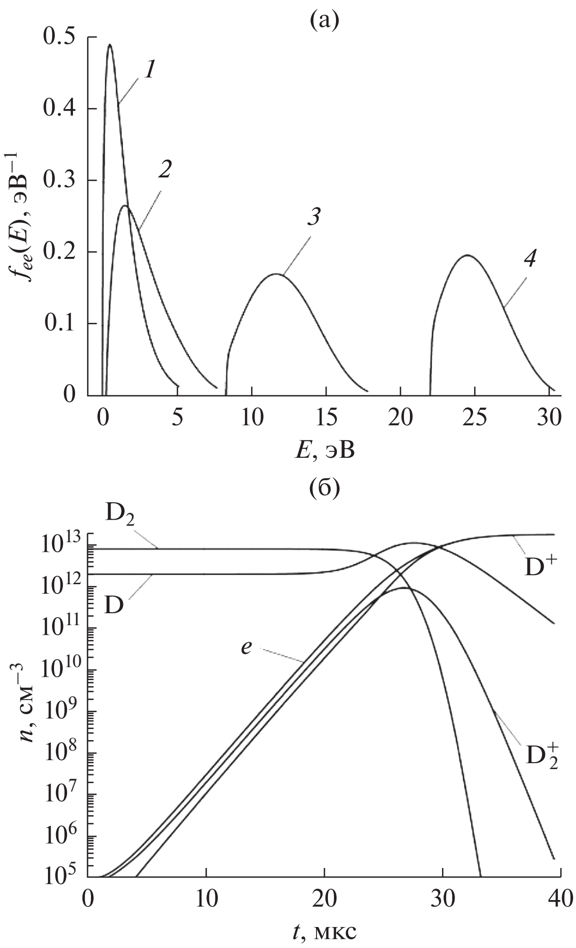


Рис. 3. Результаты расчетов: (а) – эволюция ФР электронов по энергии в течение времени: *1* – 0 мкс, *2* – 0.1, *3* – 0.5, *4* – 1; (б) – динамика концентраций компонент разряда.

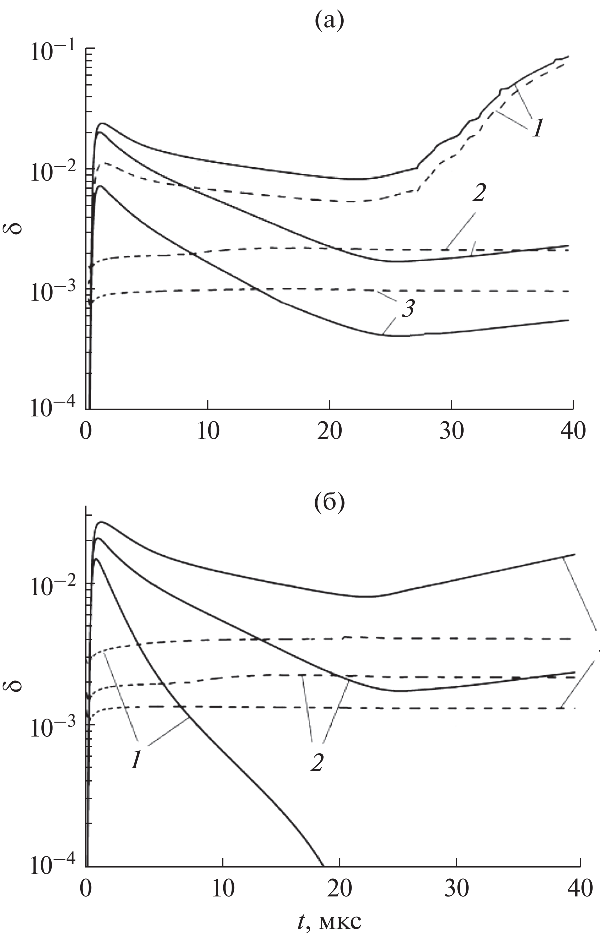


Рис. 4. Зависимость погрешности решения кинетического уравнения от численных параметров модели: (а) – точности разбиения области определения: *1* – NF = 101, *2* – 201, *3* – 401; (б) – диапазоны учитываемых значений функций $f_e(E)$ и $Stf_e(E)$: *1* – K = 10, *2* – 20, *3* – 30.

статочно больших значений интеграла столкновений, а штриховыми линиями – сумма величин δ_f и δ_{fE}, выполняющая аналогичную роль для ФР. Несмотря на то что погрешности интеграла столкновений и ФР неразрывно связаны, их рассмотрение отдельно друг от друга удобно для разделения их источников, что проявится позднее. Пока же из рис. 4а следует, что погрешность моделирования эволюции ФР не превышает единиц процентов при использовании от 200 точек и выше. Кроме того, полученные результаты по концентрациям и средним энергиям плазменных компонент отличаются друг от друга не более чем на 0.4%. Отмечая также, что время моделирования для рассматриваемых параметров N составляло 18, 26 и 188 ч соответственно, можно судить в целом о возможности осуществления адекватного моделирования физических процессов посредством разработанного алгоритма за приемлемые сроки, а также о конкретных значениях NF, NF_0 и $NF_{\max}$, которые следует использовать в текущей задаче.

Точность решения кинетического уравнения также определяется параметрами K_f и K_{St}, чье влияние оценивалось при фиксированных значениях $NF = NF_0 = NF_{\max} = 201$. Динамика погрешностей при вариации этих параметров представлена на рис. 4б.

Погрешность ФР изменяется относительно параметров K_f и K_{St} – уменьшается при их возрастании. Противоположным образом ведет себя погрешность интеграла столкновений, что обусловлено следующим. Оценка неучтенных значений ФР и интеграла столкновений происходит на конечном диапазоне энергий, определяемом параметрами NF_0 и $NF_{\max}$. И если в случае рассмотрения погрешности ФР, которая монотонно уменьшается при удалении от своего максимального значения, величина оцениваемых значений также стремится к нулю и погрешность уменьшается, то при рассмотрении интеграла столкновений, который вследствие наличия неупругих процессов указанного свойства лишен, оцениваемая погрешность может и возрастать при увеличении диапазона учитываемых значений. Например, для представленных на рис. 4б случаев K_f и K_{St}, равных 10 и 30 в момент времени 20 мкс, область определения ФР находится в пределах от 429.3 до 429.9 эВ и от 423.8 до 430.4 эВ соответственно. Таким образом, размер области, в которой оценивается погрешность, возрастает с 1.8 до 6.6 эВ, а вместе с ним возрастает и сама погрешность. Тем не менее различия в полученных результатах концентрации и температуры плазменных компонент не превосходят 0.7%. Хотя используемая оценка погрешности решения кинетического уравнения Больцмана является, по сути, оценкой снизу, затухающий характер ее роста, представленный на рис. 4б, позволяет оценивать ее на уровне нескольких процентов, что является приемлемым для практического использования разрабатываемого алгоритма.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработана программа математического моделирования кинетики плазмы газового разряда с учетом временно́й эволюции функции распределения электронов по энергии. Программа учитывает поступление в разряд энергии извне, упругие соударения электронов с электронами и с тяжелыми частицами, а также неупругие реакции возбуждения (без учета заселенности различных энергетических уровней) и превращения атомов и молекул. Вводя данные о начальной ФР электронов, средней энергии тяжелых компонент, их концентрации, сечениях требуемых реакций, а также описывая механизм поступления энергии извне, можно следить за развитием газового разряда с течением времени, получая данные о текущем виде ФР электронов, средней энергии и концентрации всех компонент разряда. Указанная возможность продемонстрирована на примере СВЧ-разряда в режиме электронно-циклотронного резонанса в молекулярном дейтерии. Полученные при таком тестировании результаты качественно и количественно соответствуют результатам других моделей при схожих начальных данных [3, 11]. Экспериментальные данные по ФР электронов в СВЧ-разряде с электронно-циклотронным резонансом в водороде при схожих давлениях (~1 Па) приводятся, например, в [19, 20]. Сложная геометрия представленного в этих работах источника ионов и отсутствие распределения напряженности электрического поля делают явное сравнение результатов затруднительным. Тем не менее полученные ФР электронов обладают сходством с представленными результатами. Таким образом, описанную в настоящей работе программу можно будет использовать для моделирования кинетических процессов в различных газовых разрядах и с учетом эволюции ФР, в частности при исследовании кинетики СВЧ-разряда в режиме электронно-циклотронного резонанса в молекулярном дейтерии.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 19-32-90033.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Shakhatov V.A., Lebedev Y.A., Lacoste A., Bechu S.* The Role of Secondary Processes in Kinetics of Triplet States of a Hydrogen Molecule in an ECR Discharge // J. Phys.: Conf. Ser. 2017. V. 927. 012052.
2. *Сторожев Д.А.* Кинетические процессы в плазме тлеющего разряда // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2013. Т. 14. С. 417.
3. *Сторожев Д.А.* Численное моделирование кинетики ионизации и диссоциации водорода в плазме разряда Пеннинга в приближении ЛТР // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2014. Т. 15. С. 229.
4. *Шахатов В.А., Гордеев О.А.* Исследование плазмы тлеющего и контрагированного разряда в азоте методами спектроскопии КАРС, оптической интерферометрии и численного моделирования // ЖТФ. 2005. Т. 75. № 12. С. 56.
5. *Федосеев А.В., Сухинин Г.И.* Пространственно-временна́я эволюция функции распределения электронов в знакопеременном электрическом поле // Теплофизика и аэромеханика. 2005. Т. 75. С. 609.
6. *Capitelli M., Hassouni K.* Coupling of Plasma Chemistry, Vibrational Kinetics, Collisional-Radiative Models and Electron Energy Distribution Functions under Non-Equilibrium Conditions // Plasma Processes Polym. 2017. V. 14. 1600109.
7. *Capitelli M., Colonna G., Pietanza L.D., D'Ammando G.* Coupling of Radiation, Excited States and Electron Energy Distribution Function in Non-equilibrium Hydrogen Plasmas // Spectrochim. Acta. Part B: Atomic Spectroscopy. 2013. V. 83–84. P. 1.
8. *Dyatko A.N., Kochetov V.I., Napartovich P.A.* Non-thermal Plasma Instabilities Induced by Deformation of the Electron Energy Distribution Function // Plasma Sources Sci. Technol. 2014. V. 23. 043001.
9. *Шахатов В.А., Лебедев Ю.А., Lacoste A., Bechu S.* Кинетика электронных состояний молекул водорода в неравновесных разрядах. Синглетные состояния // ТВТ. 2016. Т. 54. № 1. С. 120.
10. *Шахатов В.А., Лебедев Ю.А., Lacoste A., Bechu S.* Кинетика электронных состояний молекул водорода в неравновесных разрядах. Основное электронное состояние // ТВТ. 2015. Т. 53. № 4. С. 601.
11. *Степанов Д.С., Чеботарев А.В., Школьников Э.Я.* Кинетика дейтериевой газоразрядной плазмы в резонаторе нейтронного генератора в режиме электронно-циклотронного резонанса // ТВТ. 2018. Т. 56. № 6. С. 865.
12. *Степанов Д.С., Чеботарев А.В., Школьников Э.Я.* Анализ режимов работы СВЧ-источника ионов

в режиме электронно-циклотронного резонанса для портативного нейтронного генератора // ТВТ. 2019. Т. 57. № 3. С. 347.

13. *Ландау Л.Д.* Физическая кинетика. М.: Физматлит, 2007. 535 с.
14. *Opal C.B., Peterson W.K., Beaty E.C.* Measurements of Secondary-Electron Spectra Produced by Electron Impact Ionization of a Number of Simple Gases // J. Chem. Phys. 1971. V. 55. P. 4100.
15. *Vahedi V., Surendra M.* A Monte Carlo Collision Model for PIC Method: Applications to Argon and Oxygen Discharges // Comp. Phys. Comm. 1995. V. 87. P. 179.
16. *Аккерман А.Ф., Никитушев Ю.М., Ботвин В.А.* Решение методом Монте-Карло задач переноса быстрых электронов в веществе. Алма-Ата: Наука, 1972. 165 с.
17. *Zerby C.D., Keller F.L.* Electron Transport Theory, Calculations, and Experiments // Nucl. Sci. Eng. 1967. V. 27. P. 190.
18. *Griffiths D., Higham D.* Numerical Methods for Ordinary Differential Equations. Springer, 2010. 274 p.
19. *Svarnas P., Annaratone B.M., Bechu S., Pelletier J., Bacal M.* Study of Hydrogen Plasma in the Negative-ion Extraction Region // Plasma Sources Sci. Technol. 2009. V. 18. 045010.
20. *Bechu S., Soum-Glaude A., Bes A., Lacoste A., Svarnas P., Aleiferis S., Ivanov A.A. Jr., Bacal M.* Multi-dipolar Microwave Plasmas and Their Application to Negative Ion Production // Phys. Plasmas. 2013. V. 20. 101601.

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР, 2021, том 59, № 1, с. 22–30

УДК 533.9.03.537.5

ВЛИЯНИЕ МЕЖЭЛЕКТРОДНОГО РАССТОЯНИЯ НА ОСНОВНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПУЛЬСИРУЮЩЕГО ПОПЕРЕЧНО-ПРОДОЛЬНОГО РАЗРЯДА В ВЫСОКОСКОРОСТНЫХ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ГАЗОВЫХ ПОТОКАХ

© 2021 г. А. А. Логунов[1], К. Н. Корнев[1], Л. В. Шибкова[1], В. М. Шибков[1, *]

[1]*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

**E-mail: shibkov@phys.msu.ru*

Поступила в редакцию 02.08.2019 г.
После доработки 16.04.2020 г.
Принята к публикации 18.06.2020 г.

Реализован нестационарный поперечно-продольный электродный разряд, создаваемый в широком диапазоне изменения внешних условий: скорость воздушного потока изменялась от 150 до 550 м/с, минимальное межэлектродное расстояние – от 0.2 до 0.8 мм, максимальное значение пульсирующего разрядного тока – от 5.5 до 16 А. Показано, что увеличение разрядного тока ведет к росту максимально достижимой длины плазменного канала и уменьшению продольного электрического поля и частоты пульсации плазменной петли. Увеличение межэлектродного расстояния приводит к росту напряжения на разряде, длины плазменного канала и продольной напряженности электрического поля в плазме, тогда как частота пульсации напряжения на разрядном промежутке, разрядного тока и плазменной петли уменьшается. Увеличение скорости потока ведет к росту напряженности электрического поля в плазме и частоты пульсации разряда, тогда как падение напряжения на разряде не зависит от скорости потока, а полная длина плазменной петли уменьшается. Показано, что добавление пропана в воздушный поток существенно изменяет зависимость частоты пульсации плазменной петли от скорости потока, разрядного тока и эквивалентного отношения пропана в топливной смеси.

DOI: 10.31857/S0040364421010117

ВВЕДЕНИЕ

В последнее время интенсивно развивается новое направление в физике плазмы – плазменная аэродинамика. При этом для улучшения аэродинамических характеристик летательных аппаратов предлагается с помощью электрических разрядов создавать перед ними и на их несущих поверхностях плазменные образования. Плазменная технология используется также для целей уменьшения времени воспламенения горючего, управления процессом сверхзвукового горения и его стабилизации в прямоточном воздушно-реактивном двигателе. С начала 1960-х годов проводятся исследования параметров низкотемпературной плазмы, создаваемой в сверхзвуковых потоках воздуха. Основополагающими работами в области плазменной аэродинамики являются исследования свойств поперечных электрических разрядов постоянного тока в сверхзвуковых потоках воздуха [1, 2]. Влияние высокоскоростного течения на свойства продольного разряда анализировалось в [3], где рассмотрены вопросы, связанные с возможностью существования продольного разряда в случае, когда дрейфовая скорость положительных ионов, движущихся от анода к катоду, становится соизмеримой со скоростью потока, распространяющегося в противоположном направлении. С целью воспламенения углеводородных топлив в условиях сверхзвукового воздушного потока применяются различного типа разряды, в частности импульсные поперечные разряды постоянного тока [4, 5], свободно локализованные СВЧ-разряды, создаваемые в сфокусированном пучке электромагнитного излучения [6, 7], а также поверхностный СВЧ-разряд, создаваемый на диэлектрической антенне [8–11]. В работах [12–14] изучается возможность применения для воспламенения углеводородного топлива высоковольтных наносекундных разрядов. Проведено также исследование горения при одновременном воздействии на газ ударной волны и импульсного неравновесного разряда. В [15] рассмотрена возможность использования конструкции плазменных генераторов на основе факельного разряда в качестве воспламенителя этилена и авиационного керосина в камере сгорания прямоточного воздушно-реактивного двигателя. В работах [16–20] предложно использовать поперечно-продольный пульсирующий в потоке воздуха разряд для стабилизации горения углеводородного топлива.

В настоящей статье изучаются основные характеристики нестационарного поперечно-продольного электродного разряда, создаваемого в дозвуковых и сверхзвуковых многокомпонентных газовых потоках. При включении источника постоянного напряжения по кратчайшему расстоянию между катодом и анодом происходит пробой воздуха. Образующаяся плазменная перемычка начинает сноситься высокоскоростным воздушным потоком. Плазменный канал, скользящий в направлении потока вдоль горизонтально расположенных электродов, удлиняется и искривляется. Через некоторое время концы плазменной перемычки фиксируются на концах анода и катода, а плазменный канал продолжает вытягиваться в виде петли вниз по направлению распространения потока. При этом в анодной части плазменного канала дрейфовая скорость движения ионов совпадает по направлению со скоростью потока, тогда как в катодной части петли скорость дрейфа положительных ионов противоположна направлению распространения потока. Длина канала увеличивается, падение напряжения на нем растет и может превысить пороговое пробойное значение. После этого по кратчайшему расстоянию между электродами происходит новый пробой, и процесс повторяется периодически с некоторой частотой. В работе исследуется влияние минимального межэлектродного расстояния на максимально достижимое перед повторным пробоем напряжение на разрядном промежутке, на напряженность продольного электрического поля в плазменной петле, на длину разрядного канала, частоту пульсаций напряжения и разрядного тока. Рассматривается влияние скорости потока на частоту пульсаций разряда при различных составах пропан-воздушной смеси и значениях разрядного тока.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА

Исследования поперечно-продольного разряда, создаваемого в двух конфигурациях, проводились на экспериментальной установке, подробно описанной в предыдущих работах [16–19]. Установка включает в себя вакуумную камеру с внутренним диаметром 1 м и длиной 3 м, систему для создания высокоскоростного потока, высоковольтный источник питания постоянного тока, систему синхронизации и диагностическую аппаратуру. Система хранения воздуха высокого давления состоит из газгольдера объемом 0.56 м^3 с компрессором, поднимающим давление воздуха в ресивере до $p = 1-5$ атм.; клапана высокого давления; детектора для измерения динамического давления; электромагнитного клапана с временем срабатывания $t \sim 0.05$ с, обеспечивающего длительность пуска $\tau = 0.5-3.0$ с. Массовый расход воздуха в эксперименте мог изменяться от 40 до 150 г/с. Система накопления и хранения газообразного горючего состоит из стандартного баллона объемом 0.04 м^3, содержащего жидкий пропан. Через запорный клапан и редуктор уже газообразное топливо поступает в ресивер объемом 0.012 м^3. При открытии клапана воздух и пропан поступают в смеситель, установленный в дозвуковой части канала. Смешение происходит в основном до критического сечения сверхзвукового сопла Лаваля. Секундный массовый расход пропана в эксперименте мог изменяться от 3 до 6 г/с. Эквивалентное отношение для пропана, равное отношению доли пропана в топливе к его доле в стехиометрической смеси, изменялось от 0.5 до 1.7.

В первой серии экспериментов электродный разряд формировался на поверхности диэлектрической пластины, обтекаемой высокоскоростной воздушной струей. Во второй серии изучался пульсирующий разряд, генерируемый в высокоскоростном воздушном потоке внутри аэродинамического канала.

В первой конфигурации разряд создавался на верхней поверхности тефлоновой пластины. Пластина плотно пристыковывалась к сопловому блоку, так что ее верхняя поверхность являлась продолжением нижней стенки прямоугольного сопла Лаваля. Данная система помещалась в открытую барокамеру при атмосферном давлении воздуха. Истекающая из сопла высокоскоростная воздушная струя распространялась вдоль верхней поверхности пластины. На рис. 1 представлено схематическое изображение блока питания *3–5*, электродной системы *1* и плазменной петли *2* пульсирующего поперечно-продольного разряда (вид в направлении, перпендикулярном поверхности пластины).

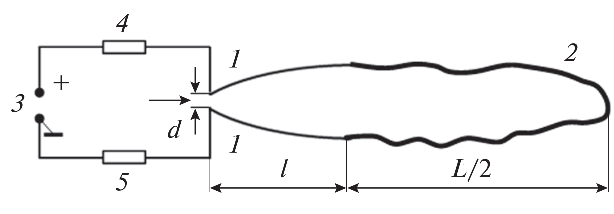


Рис. 1. Схематическое изображение блока питания, электродной системы и плазменной петли пульсирующего поперечно-продольного разряда: *1* – электродный узел (анод вверху, катод внизу), *2* – плазменная петля, *3* – источник питания постоянного тока, *4* – балластное сопротивление, *5* – сопротивление для измерения разрядного тока; l – продольная длина электродов, L – полная длина плазменного канала; стрелкой показано направление распространения воздушной струи.

На пластине заподлицо с ее поверхностью монтировались два хорошо обтекаемых медных электрода *1* специальной конфигурации [16]. Длина электродов одинакова и составляет $l = 33$ мм. Электроды располагались симметрично относительно оси распространения воздушной струи. Максимальная толщина электродов не превышала 1 мм, а ширина – 5 мм. Кратчайшее расстояние между электродами d можно было изменять ступенчато от 0.1 до 1 мм. Расстояние определялось с помощью набора эталонных пластин с шагом 0.1 мм. Максимальное расстояние между анодом и катодом равно 20 мм. Массовый расход воздуха в эксперименте мог изменяться от 40 до 125 г/с. Расход пропана варьировался от 3 до 5.5 г/с. Вакуумная система позволяла проводить эксперименты в диапазоне давлений воздуха в разрядной камере от 10 до 760 Тор. Данная серия экспериментов проводилась в открытой барокамере при атмосферном давлении воздуха.

Во второй серии экспериментов исследовался поперечно-продольный разряд, создаваемый в дозвуковых и сверхзвуковых потоках воздуха между двумя электродами, смонтированными внутри расширяющегося аэродинамического канала [17–22]. Электроды располагались симметрично относительно оси аэродинамического канала и не касались его стенок. Минимальное расстояние между электродами не изменялось и было равно 0.2 мм. Длина электродов $l = 65$ мм. Продольная длина канала – 50 см. Отношение выходного сечения $S_2 = 38$ см^2 к входному сечению $S_1 = 3$ см^2 канала $S_2/S_1 = 12.7$. Вторая серия экспериментов также проводилась в открытой барокамере при атмосферном давлении воздуха. Пульсирующий разряд создается с помощью стационарного источника питания с выходным напряжением $U = 4.5$ кВ и внутренним сопротивлением $r = 100$ Ом. В электрическую цепь последовательно включены источник питания, балластное сопротивление, величина которого могла ступенчато переключаться в пять фиксированных позиций $R_4 = 145$–675 Ом, безындукционное сопротивление $R_5 = 0.32$ Ом, служащее для измерения разрядного тока, и разрядный промежуток. Эксперименты проводились при пяти значениях максимального пульсирующего тока 5.5, 9.8, 12.5, 14.5 и 15.5 А. Длительность импульса напряжения изменялась от 0.5 до 2 с.

МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Для измерений использовался диагностический комплекс, состоящий из цифровых спектрографов, осциллографов, фото- и видеокамер, фотоэлектронных умножителей, электрических зондов, тензовесов, датчиков давления, персональных компьютеров. Основные параметры пульсирующего разряда определялись с помощью автоматизированной системы сбора и обработки информации, позволяющей в масштабах реального времени проводить регистрацию спектров излучения газоразрядной плазмы, сигналов от электрических зондов, импульсных датчиков давления, термопарных датчиков, фотоэлектронного умножителя, тензодатчиков, безындукционного малого сопротивления, высоковольтного безындукционного делителя. Безындукционное сопротивление $R_5 = 0.32$ Ом использовалось для регистрации осциллограммы разрядного тока. Временно́й ход падения напряжения на разрядном промежутке измерялся с использованием безындукционного делителя напряжения с коэффициентом деления $k = 8760$. Процесс развития плазменной петли фиксировался с использованием цифровой видеокамеры “ВидеоСпринт” с электронно-оптическим затвором и цифрового фотоаппарата D50. Съемка проводилась при частоте повторения кадров 6024 Гц с временем экспозиции одного кадра 2 мкс.

С помощью высокоскоростной видео- и фотосъемки, зондового метода, осциллографии, фотоэлектронного умножителя определялась динамика разряда: изменение во времени длины плазменного канала, скорости его распространения, частоты и, соответственно, периода пульсаций разряда, частоты пульсации интенсивности свечения, частоты пульсаций напряжения на разряде и разрядного тока, напряженности электрического поля. Средняя по длине плазменного канала напряженность электрического поля вычислялась по формуле $E = U/L$, где U и L – падение напряжения на плазменном канале и его полная длина. Длина L в различные моменты времени существования пульсирующего разряда определялась с помощью высокоскоростной видеосъемки, позволяющей регистрировать общий вид разряда. В [19] показано, что средняя по длине плазменного канала напряженность электрического поля остается практически постоянной в течение развития одной плазменной петли. Поэтому в данной серии экспериментов вычисления E проводились для момента времени, когда падение напряжения на разряде достигает максимального значения, при этом плазменный канал – максимальной длины. Полученные результаты сравнивались с данными, полученными в работе [23], в которой проводилась регистрация временно́го хода плавающих потенциалов $\varphi(t)$ с помощью двух подвижных зондов, расстояние между которыми было фиксировано $a = 7$ мм. Напряженность продольного электрического поля в катодной и анодной частях плазменной петли определялась по формуле $E(t) = \Delta\varphi(t)/a$. Полученные результаты достаточно хорошо согласуются друг с другом. Однако применение зондового метода измерения при больших значениях потенциалов плазмы (особенно в анодной части плазменной

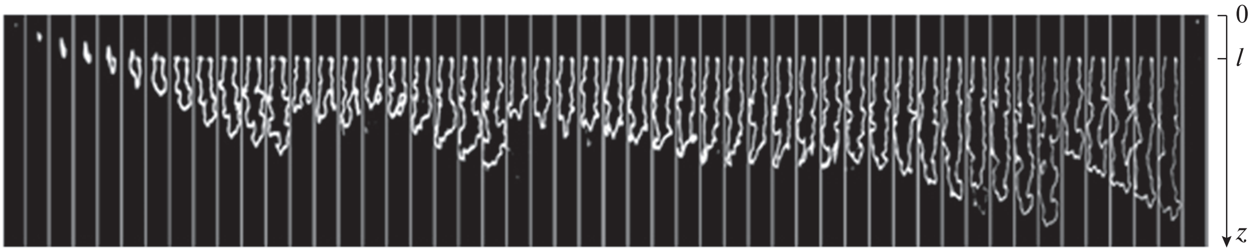


Рис. 2. Динамика развития плазменной петли пульсирующего разряда в дозвуковой воздушной струе: направление времени слева направо; распространение струи сверху вниз со скоростью υ = 245 м/с; максимальный разрядный ток i = 15.5 А, d = 0.7 мм; время экспозиции одного кадра – 2 мкс; временно́й интервал между кадрами – 167 мкс.

петли) затруднительно, требуется применять оптические развязки для защиты измерительной аппаратуры. Поэтому в данной работе продольное электрическое поле определялось по измеренному падению напряжения на разряде и регистрации полной длины канала.

Частота пульсаций разряда является важной характеристикой, определяющей режим поддержания горения топливных смесей в высокоскоростных потоках. В экспериментах частота пульсаций разряда находилась тремя способами. В первом с помощью скоростной цифровой видеокамеры проводилась съемка нестационарного пульсирующего разряда. За один пуск регистрировалось до двенадцати тысяч кадров. Обработка полученных данных позволяла получить время развития каждой из зарегистрированных плазменных петель и соответственно среднюю частоту пульсации разряда. Второй метод заключается в регистрации осциллограмм напряжения и разрядного тока, а также свечения плазмы с последующим подсчетом числа повторных пробоев за фиксированное время. Третий метод применялся при определении высоких частот пульсаций разряда, создаваемого в сверхзвуковых потоках газа, или при наличии нескольких повторных пробоев. В этом случае проводилась математическая обработка осциллограмм тока и напряжения на разряде с использованием стандартной процедуры фурье-преобразования и определялась основная частота пульсаций и ее гармоники. Все три метода дают достаточно хорошо совпадающие результаты, если учесть нестабильность разряда, создаваемого в турбулентном высокоскоростном воздушном потоке.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

При включении источника питания по кратчайшему расстоянию d между катодом и анодом происходит пробой воздуха (вверху первого кадра слева на рис. 2). Образующаяся при этом плазменная перемычка начинает сноситься высокоскоростным воздушным потоком. Длина плазменного канала, скользящего вдоль электродов, увеличивается и искривляется. Воздушная струя распространяется вдоль направления z. Координате $z = 0$ соответствует точка минимума расстояния между катодом и анодом, координате $z = l$ – плоскость, в которой оканчиваются электроды. В условиях данного эксперимента (υ = 245 м/с, i = 15.5 А, d = 0.7 мм) точка скольжения плазменной перемычки вдоль анода (на всех кадрах рис. 2 справа) движется приблизительно на 20 м/с быстрее точки скольжения канала вдоль катода. При этом скорости перемещения анодного и катодного пятен вдоль электродов меньше, чем скорость центральной части плазменной петли. Анодное пятно в условиях данного эксперимента приблизительно через 0.6 мс после возникновения между электродами плазменного образования (рис. 2) достигает конца анода и фиксируется на нем. Затем еще через 0.5 мс после этого на конце второго электрода фиксируется катодное пятно. Плазменный канал продолжает вытягиваться в виде петли вниз по направлению распространения потока. Длина канала увеличивается, падение напряжения на нем растет и может превысить пороговое пробойное значение. После этого по кратчайшему расстоянию между электродами происходит новый пробой (вверху последнего кадра справа на рис. 2), и процесс повторяется периодически с некоторой частотой.

В условиях данного эксперимента период пульсации разряда составляет 8.3 мс, чему соответствует частота пульсаций плазменной петли 120 Гц. В течение всего времени существования плазменной петли на рис. 2 отчетливо наблюдаются ярко светящиеся области на концах электродов (координата $z = l$), что соответствует катодному и анодному пятнам с высокими значениями температуры газа и концентрации электронов. В экспериментах могут реализовываться два режима поддержания разряда. В первом случае плазменная петля достигает максимально возможной длины без промежуточных повторных пробоев. Во втором случае в течение развития одной петли реализуется несколько дополнительных повторных пробоев (на рис. 2 реализуются три дополнительных пробоя в течение развития

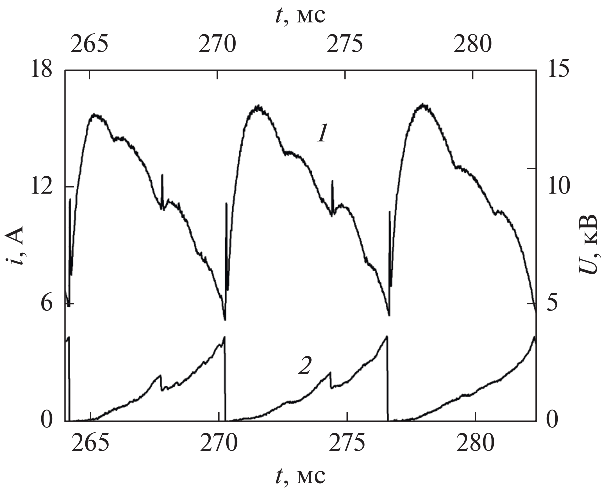


Рис. 3. Фрагмент осциллограмм тока (*1*) и напряжения (*2*) на разрядном промежутке.

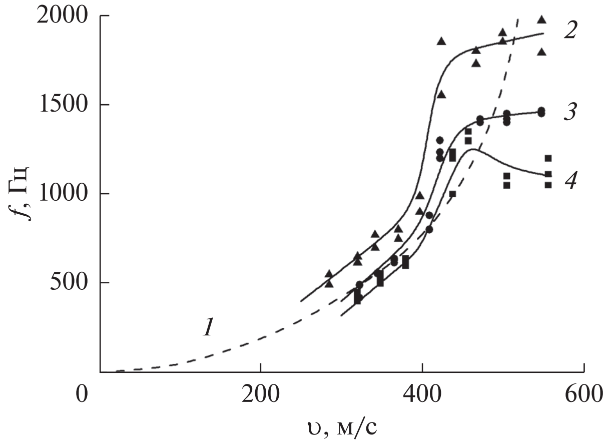


Рис. 4. Зависимость частоты пульсаций разряда от скорости потока воздуха (*1*) и пропан-воздушного потока при постоянном расходе пропана 4.4 г/с и различных максимальных значений пульсирующего тока: *2* – 5.5 А, *3* – 12.5, *4* – 15.5.

одной плазменной петли: 12-й, 21-й и 44-й кадры). В обоих режимах процесс формирования разрядной петли в потоке периодически повторяется, т.е. данный разряд, создаваемый в движущемся воздухе с помощью стационарного источника питания, представляет собой нестационарный пульсирующий поперечно-продольный разряд.

В качестве примера на рис. 3 приведен фрагмент длительностью 18 мс осциллограмм тока *1* и напряжения *2*, произвольно выбранный из полного времени пуска 2 с. Минимальное расстояние между анодом и катодом $d = 0.7$ мм. Скорость воздушной струи $\upsilon = 170$ м/с.

Видно, что глубина модуляции напряжения *2* на разрядном промежутке достигает 100%. В данных условиях (третья петля на рис. 3) напряжение в процессе развития петли постепенно нарастает до максимального значения $U = 3.6$ кВ, после чего по минимальному расстоянию между катодом и анодом происходит повторный пробой, а напряжение падает практически до нуля. В этот момент времени на осциллограмме тока наблюдаются кратковременные униполярные пики, что связано с формированием в стадии пробоя пучка быстрых электронов [18, 24]. Возможны также дополнительные пробои между анодной и катодной частями плазменного канала (первая и вторая петли). В эти моменты времени также формируются пучки быстрых электронов. При этом напряжение на разрядном промежутке не падает до нуля, а остается приблизительно на уровне 1.5 кВ. Максимальное значение разрядного тока i достигает величины порядка 16 А, в то время как минимальное значение тока порядка 6 А, т.е. глубина его модуляции – 62%. Особенно следует отметить, что разрядный ток в течение всего пуска длительностью 2 с никогда не падает до нуля. Вначале происходит новый пробой между электродами, образующаяся плазма обладает высокой электропроводностью и шунтирует предыдущую плазменную петлю, которая начинает распадаться и сносится вниз по потоку. С увеличением скорости воздушной струи глубина модуляции тока уменьшается, и при $\upsilon = 550$ м/с изменение i в процессе развития каждой петли не превышает 5% от максимального значения 16 А.

Зависимость частоты пульсаций поперечно-продольного разряда, генерируемого внутри расширяющегося аэродинамического канала (вторая конфигурация создания разряда), от скорости воздушного потока представлена на рис. 4.

Экспериментально получено, что при любых значениях скорости потока воздуха увеличение разрядного тока от 5.5 до 15.5 А приводит к незначительному, порядка 10%, изменению частоты пульсации разряда. Поэтому на рис. 4 кривая *1* представляет собой аппроксимацию, полученную усреднением экспериментальных значений частоты пульсации разряда при различных токах для каждого значения скорости потока. В эксперименте наблюдается сильная зависимость частоты пульсации разряда от скорости воздушного потока. Видно, что увеличение скорости воздушного потока от 100 до 520 м/с приводит к монотонному росту частоты пульсаций плазменной петли от 100 до 2000 Гц.

Параметры пульсирующего разряда изучались также при различных составах топливовоздушной смеси. На рис. 4 представлена зависимость частоты пульсаций разряда от скорости пропан-воздушного потока при различных максимальных значениях пульсирующего тока. В воздушный поток добавляется пропан с постоянным расходом 4.4 г/с. В этом случае зависимость ча-

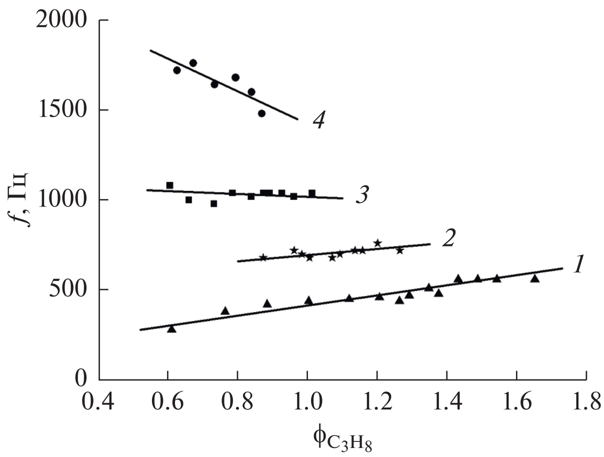


Рис. 5. Зависимость частоты пульсаций от эквивалентного отношения для пропана при скорости пропан-воздушного потока: *1* – 275 м/с, *2* – 370, *3* – 430, *4* – 470; разрядный ток: *1*, *2* – 15.5 А; *3*, *4* – 9.8.

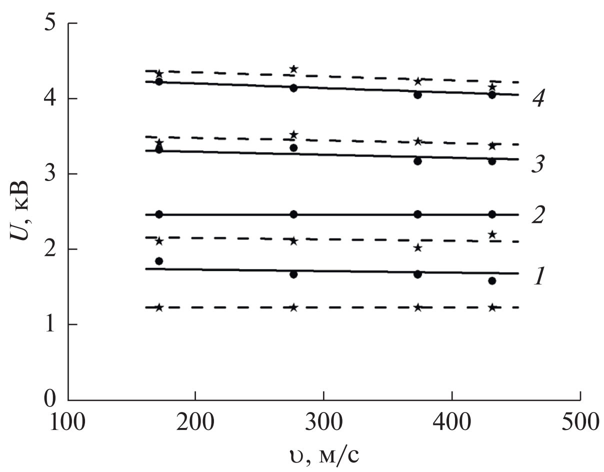


Рис. 6. Зависимость максимально достижимого напряжения на разрядном промежутке от скорости воздушного потока при разрядном токе 5.5 А (сплошные прямые) и 14.5 А (штриховые) и различных значениях минимального расстояния между анодом и катодом: *1* – 0.2 мм, *2* – 0.4, *3* – 0.6, *4* – 0.8.

стоты от скорости качественно меняется при переходе через скорость звука в воздухе. При малых скоростях $\upsilon < 400$ м/с частота пульсации разряда близка к частоте пульсации плазменной петли в воздушном потоке. Это соответствует обедненным по отношению к окислителю и, соответственно, обогащенным пропаном топливовоздушным смесям. Известно, что эффективность горения обогащенных пропаном топливных смесей низкая. При этом измеренная в эксперименте тяга, возникающая при горении пропана в воздушном потоке в аэродинамическом расширяющемся канале (продольная длина канала – 50 см, отношение выходного сечения $S_2 = 38$ см^2 к входному сечению $S_1 = 3$ см^2 канала $S_2/S_1 = 12.7$), мала, однако она монотонно возрастает при уменьшении эквивалентного отношения для пропана. При высоких скоростях υ потока (в обедненных топливом смесях) происходит резкое изменение зависимости частоты f от скорости и разрядного тока. Частота осцилляции плазменной петли при $\upsilon > 400$ м/с сильно зависит от разрядного тока, уменьшаясь почти в два раза при увеличении тока от 5.5 до 15.5 А.

Также получена зависимость частоты пульсации плазменной петли от эквивалентного отношения пропана в топливной смеси для двух значений разрядного тока и четырех значений скорости потока. Результаты представлены на рис. 5. При увеличении скорости потока частота пульсаций разряда растет как для обедненных пропаном топливовоздушных, так и для богатых смесей. Следует отметить, что при сверхзвуковой скорости потока $\upsilon = 470$ м/с увеличение эквивалентного отношения ведет к уменьшению частоты пульсаций, а при дозвуковой скорости $\upsilon = 275$ м/с – к ее росту.

На рис. 6 представлены результаты экспериментов по определению степени влияния скорости воздушного потока и минимального расстояния между анодом и катодом на максимально достижимое напряжение на разрядном промежутке, при котором происходит повторный пробой и формируется новая плазменная перемычка. Чтобы не перегружать рисунок, результаты приведены только для двух значений разрядного тока и четырех минимальных расстояний между электродами. При токе 5.5 А увеличение межэлектродного расстояния d от 0.2 до 0.8 мм приводит к росту напряжения на разрядном промежутке от 1.7 до 4.2 кВ, причем при любых скоростях потока максимально достижимое напряжение при фиксированном d остается в пределах точности измерений постоянным. Увеличение разрядного тока при больших $d = 0.8$ мм приводит к незначительному на 100 В росту напряжения, тогда как при малых $d = 0.2$ мм напряжение на разрядном промежутке падает примерно на 500 В.

Следует отметить, что напряженность электрического поля, рассчитанная по формуле $E = U/d$ (U – напряжение, при котором происходит повторный пробой, d – минимальное расстояние между анодом и катодом), равна 72 кВ/см при $d = 0.2$ мм, 57 кВ/см при $d = 0.4$ мм, 55 кВ/см при $d = 0.6$ мм, 52 кВ/см при $d = 0.8$ мм. Так как пробой осуществляется в высокоскоростном потоке воздуха при скорости 150–450 м/с, а для создания продольно-поперечного разряда используется расходящаяся электродная конфигурация, то, как показывают оценки, расстояние, по которому осуществляется пробой воздуха, увеличивается по сравнению с минимальным расстоянием при-

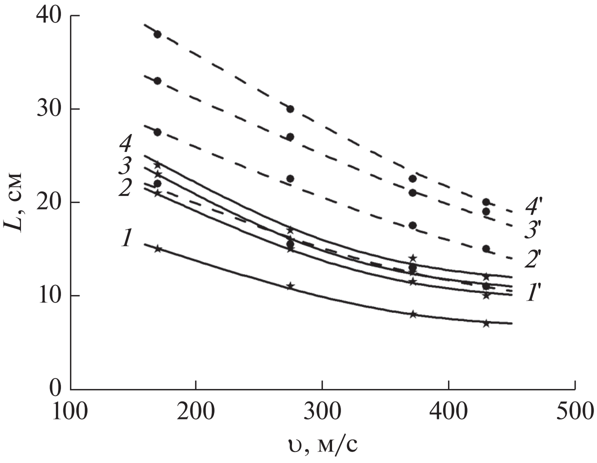


Рис. 7. Зависимость длины плазменного канала от скорости потока воздуха при разрядном токе 5.5 А (сплошные кривые) и 15.5 А (штриховые) и различных значениях минимального расстояния между анодом и катодом: *1*, *1'* – 0.2 мм; *2*, *2'* – 0.4; *3*, *3'* – 0.6; *4*, *4'* – 0.8.

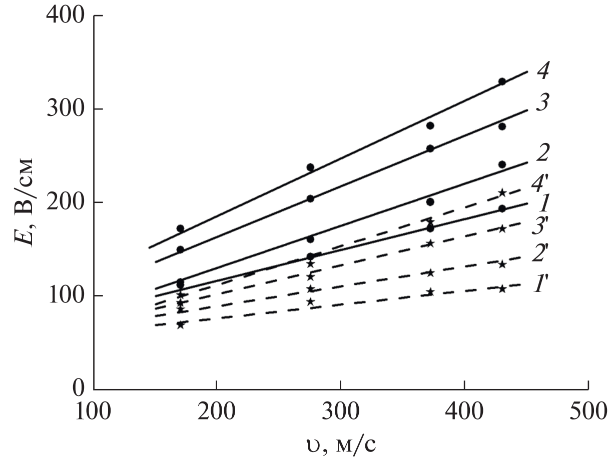


Рис. 8. Зависимость средней по длине канала напряженности продольного электрического поля в плазменной петле от скорости потока воздуха при разрядном токе 5.5 А (сплошные кривые) и 15.5 А (штриховые) и различных минимальных расстояниях между анодом и катодом: *1*, *1'* – 0.2 мм; *2*, *2'* – 0.4; *3*, *3'* – 0.6; *4*, *4'* – 0.8.

близительно в 1.5–2 раза. В этом случае среднее значение электрического поля приближенно равно 35 кВ/см, что близко к пробойному полю в неподвижном воздухе при атмосферном давлении.

Для определения средней по длине плазменного канала напряженности электрического поля наряду с временны́м ходом падения напряжения на разряде необходимо знать зависимость полной длины плазменной петли от времени. Падение напряжения на плазменной петле определялось в каждом конкретном случае по осциллограмме, подобной приведенной на рис. 3. На рис. 7 представлены зависимости полной длины плазменного канала поперечно-продольного разряда от скорости воздушного потока при двух разрядных токах и четырех минимальных расстояниях между электродами.

При всех условиях эксперимента полная длина L плазменного канала, приближенно равная удвоенному расстоянию, на которое распространяется передняя граница плазменной петли, отсчитываемая от плоскости, в которой оканчиваются концы анодного и катодного электродов (см. рис. 1), уменьшается с увеличением скорости воздушного потока. Увеличение разрядного тока от 5.5 до 15.5 А приводит к увеличению L при всех значениях скорости потока и межэлектродного расстояния. Полная длина плазменной петли возрастает также при увеличении минимального межэлектродного расстояния d в диапазоне 0.2–0.8 мм и росте разрядного тока от 5.5 до 15.5 А.

Зависимость средней напряженности продольного электрического поля от скорости воздушного потока представлена на рис. 8. Увеличение скорости потока приводит к росту напряженности поля при всех значениях тока и межэлектродного расстояния. Однако при любой фиксированной скорости потока увеличение разрядного тока ведет к уменьшению продольного электрического поля, тогда как рост минимального межэлектродного расстояния приводит к возрастанию поля.

Следует еще раз подчеркнуть, что данным методом измеряется среднее по длине плазменного канала продольное электрическое поле. В [23] показано, что в анодной части плазменной петли потенциал линейно уменьшается с ростом расстояния z от электрода, а в катодной части – растет, т.е. напряженность электрического поля является постоянной величиной как в анодной, так и в катодной части плазменной петли. При этом напряженность продольного электрического поля E_a в анодной части плазменной петли пульсирующего поперечно-продольного разряда систематически до 35% величины превышает соответствующее значение E_k в катодной части.

На рис. 9 представлены зависимости частоты пульсации нестационарного поперечно-продольного разряда от скорости воздушного потока при различных разрядных токах и минимальных расстояниях между катодом и анодом.

В условиях нестационарного поперечно-продольного электродного разряда, создаваемого в высокоскоростном потоке воздуха или пропан-воздушной смеси синхронно осциллируют плазменная петля, разрядный ток, напряжение на разрядном промежутке, а также свечение плазмы. Причем глубина модуляции свечения плазмы и напряжения на разряде достигает 100%, тогда как глубина пульсации разрядного тока изменя-

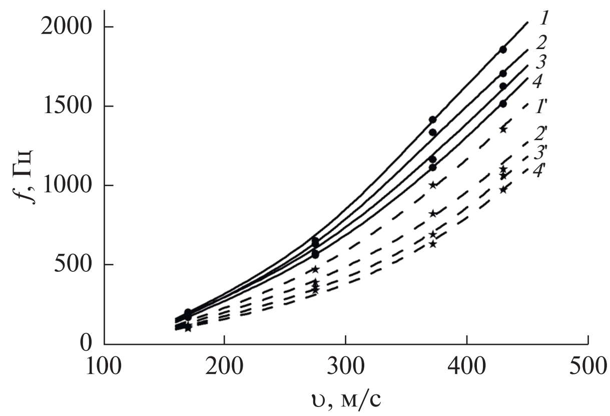


Рис. 9. Зависимость частоты пульсаций плазменной петли от скорости потока воздуха при разрядном токе 5.5 А (сплошные кривые) и 14.5 А (штриховые) и различных минимальных расстояниях между анодом и катодом: *1*, *1'* – 0.2 мм; *2*, *2'* – 0.4; *3*, *3'* – 0.6; *4*, *4'* – 0.8.

ется от 5% при сверхзвуковой скорости потока 600 м/с до 70% при 100 м/с. При этом увеличение скорости потока не влияет на максимальное напряжение на разрядном промежутке, но ведет к уменьшению полной длины пульсирующего плазменного канала и росту продольной напряженности электрического поля.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведены исследования основных характеристик нестационарного пульсирующего поперечно-продольного электродного разряда. Показано влияние скорости потока, разрядного тока и минимального расстояния между катодом и анодом на максимально достижимую длину плазменного канала, частоту его пульсаций, напряжение пробоя межэлектродного промежутка, напряженность продольного электрического поля.

Полученные результаты необходимы для выбора оптимальных условий создания разряда с целью использования плазменной технологии для управления процессом горения углеводородного топлива в камерах сгорания прямоточного воздушно-реактивного и турбореактивного двигателей.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-02-00336).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Алферов В.И., Бушмин А.С.* Электрический разряд в сверхзвуковом потоке воздуха // ЖЭТФ. 1963. Т. 44. № 6. С. 1775.
2. *Алферов В.И., Бушмин А.С., Калачев Б.В.* Исследование процессов горения разряда в потоке газа большой скорости // ЖЭТФ. 1966. Т. 51. Вып. 11. С. 1281.
3. *Пащенко Н.Т., Райзер Ю.П.* Тлеющий разряд в продольном потоке газа // Физика плазмы. 1982. Т. 8. № 5. С. 1086.
4. *Ершов А.П., Сурконт О.С., Тимофеев И.Б., Шибков В.М., Черников В.А.* Поперечные электрические разряды в сверхзвуковых потоках воздуха. Пространственно-временнáя структура и вольт-амперные характеристики разряда // ТВТ. 2004. Т. 42. № 5. С. 669.
5. *Ершов А.П., Калинин А.В., Сурконт О.С., Тимофеев И.Б., Шибков В.М., Черников В.А.* Поперечные электрические разряды в сверхзвуковых потоках воздуха. Микроскопические характеристики разряда // ТВТ. 2004. Т. 42. № 6. С. 856.
6. *Шибков В.М.* Нагрев газа в условиях свободно локализованного СВЧ-разряда в воздухе. Математическое моделирование // ТВТ. 1997. Т. 35. № 5. С. 693.
7. *Шибков В.М.* Нагрев газа в условиях свободно локализованного СВЧ-разряда в воздухе. Эксперимент // ТВТ. 1997. Т. 35. № 6. С. 871.
8. *Шибков В.М., Шибкова Л.В.* Динамика воспламенения тонких пленок спирта в условиях поверхностного сверхвысокочастотного разряда при атмосферном давлении воздуха // ЖТФ. 2009. Т. 79. № 10. С. 65.
9. *Шибков В.М., Шибкова Л.В.* Параметры пламени, возникающего при воспламенении тонких пленок спирта с помощью поверхностного СВЧ-разряда // ЖТФ. 2010. Т. 80. № 1. С. 59.
10. *Шибков В.М., Двинин С.А., Ершов А.П., Константиновский Р.С., Сурконт О.С., Черников В.А., Шибкова Л.В.* Поверхностный сверхвысокочастотный разряд в воздухе // Физика плазмы. 2007. Т. 33. № 1. С. 77.
11. *Шибков В.М., Двинин С.А., Ершов А.П., Шибкова Л.В.* Механизмы распространения поверхностного сверхвысокочастотного разряда // ЖТФ. 2005. Т. 75. № 4. С. 74.
12. *Starikovskaya S.M.* Plasma Assisted Ignition and Combustion // J. Phys. D: Appl. Phys. 2006. V. 39. № 16. P. R265.
13. *Starikovskii A.Y., Anikin N.B., Kosarev I.N., Mintoussov E.I., Nudnova M.M., Rakitin A.E., Roupassov D.V., Starikovskaia S.M., Zhukov V.P.* Nanosecond-pulsed Discharges for Plasma-assisted Combustion and Aerodynamics // J. Propul. Power. 2008. V. 24. № 6. P. 1182.
14. *Adamovich I.V., Lempert W.R., Rich J.W., Utkin Y.G.* Repetitively Pulsed Nonequilibrium Plasmas for Magnetohydrodynamic Flow Control and Plasma-assisted Combustion // J. Propul. Power. 2008. V. 24. № 6. P. 1198.
15. *Jacobsen L.S., Carter C.D., Baurle R.A., Jackson T., Williams S., Barnett J., Tam C.-J., Bivolaru D.* Plasma-assisted Ignition in Scramjets // J. Propul. Power. 2008. V. 24. № 4. P. 641.
16. *Копыл П.В., Сурконт О.С., Шибков В.М., Шибкова Л.В.* Стабилизация горения жидкого углеводородного топлива с помощью программированного СВЧ-разряда в дозвуковом воздушном потоке // Физика плазмы. 2012. Т. 38. № 6. С. 551.

17. *Шибков В.М., Шибкова Л.В., Копыл П.В., Логунов А.А.* Стабилизация с помощью низкотемпературной плазмы сверхзвукового горения пропана в расширяющемся аэродинамическом канале // ТВТ. 2019. Т. 57. № 2. С. 183.
18. *Шибков В.М., Шибкова Л.В., Логунов А.А.* Параметры плазмы пульсирующего в сверхзвуковом потоке воздуха разряда постоянного тока // Физика плазмы. 2017. Т. 43. № 3. С. 314.
19. *Шибков В.М., Шибкова Л.В., Логунов А.А.* Влияние скорости воздушного потока на основные характеристики нестационарного пульсирующего разряда, создаваемого с помощью стационарного источника питания // Физика плазмы. 2018. Т. 44. № 8. С. 661.
20. *Шибков В.М.* Влияние тепловыделения на течение газа в канале переменного сечения // ТВТ. 2019. Т. 57. № 3. С. 353.
21. *Шибков В.М., Шибкова Л.В., Логунов А.А.* Температура электронов в плазме разряда постоянного тока, создаваемого в сверхзвуковом воздушном потоке // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3: Физика. Астрономия. 2017. № 3. С. 75.
22. *Шибков В.М., Шибкова Л.В., Логунов А.А.* Степень ионизации воздуха в плазме нестационарного пульсирующего разряда в дозвуковых и сверхзвуковых потоках // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 3: Физика. Астрономия. 2018. № 5. С. 43.
23. *Шибкова Л.В., Шибков В.М., Логунов А.А., Долбня Д.С., Корнев К.Н.* Параметры плазмы пульсирующего разряда, создаваемого в высокоскоростных потоках газа. // ТВТ. 2020. Т. 58. № 6. С. 834.
24. *Шибков В.М.* Генерация быстрых электронов в плазме импульсного разряда // Физика плазмы. 2020. Т. 46. № 2. С. 186.

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР, 2021, том 59, № 1, с. 31–40

УДК 537.523.9

ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ ДИФФУЗНОГО БАРЬЕРНОГО РАЗРЯДА

© 2021 г. М. Е. Ренев[1, *], Ю. Ф. Сафронова[1], Ю. К. Стишков[1]
[1]Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
*E-mail: m.renev@2014.spbu.ru

Поступила в редакцию 22.10.2019 г.
После доработки 31.01.2020 г.
Принята к публикации 10.03.2020 г.

В работе при помощи численного моделирования исследуются структура и характеристики диффузного барьерного разряда в воздухе при атмосферном давлении в системе плоских электродов, один из которых покрыт диэлектриком. Учитываются электроны, положительные и отрицательные ионы, процессы ионизации, рекомбинации, прилипания, отлипания и фотоионизации, зарядки диэлектрика, автоэмиссии электронов с электрода. Для выявления особенностей структуры диффузного барьерного разряда рассматривались импульсы напряжения с длительностью фронтов 1 и 100 нс, скоростью нарастания напряженности электрического поля 152 и 1.52 кВ/(см нс), длительностью 2 и 500 нс соответственно. Описана 1D-структура барьерного разряда, подобная стримеру и условно названная плоским стримером: плоская волна ионизации, за фронтом которой расположен плазменный канал, а перед фронтом непроводящий газ. Традиционно диффузный разряд противопоставляется стримерному, данная работа корректирует такое представление. Получены основные этапы формирования диффузного барьерного разряда: стадии лавины, лавинно-стримерного перехода, распространения положительной и отрицательной головок плоского стримера, замыкания головок на электроды и процесс релаксации плазмы. Показано, что процесс релаксации плазмы после отключения напряжения замедленный, скорость возрастания фронта и длительность импульса существенно влияют на структуру и параметры разряда. Учет в модели внешней электрической цепи ограничил ток в системе и дал удовлетворительное количественное согласие с экспериментом.

DOI: 10.31857/S0040364420060150

ВВЕДЕНИЕ

Барьерный разряд (БР) известен с 1857 года благодаря Сименсу. Он имеет широкий спектр применений в медицине, химии, промышленности, машиностроении в качестве источника плазмы, химического реактора, очистителя воздуха и т.д. [1]. Среди новейших устройств, использующих БР, активно разрабатываются электрогидродинамические регуляторы потока, которые устанавливаются на поверхность крыла. Они способны улучшать обтекание и снижать сопротивление крыла внешнему потоку [2]. Также последнее время динамично развиваются медицинские приложения для холодной плазмы, полученной с помощью БР, например, для лечения опухолей [3] и обеззараживания инструментов. Однако, несмотря на широкое практическое применение, попрежнему структура и свойства БР являются предметом исследования.

БР – это газовый разряд, который возникает в системе электродов, когда хотя бы один из электродов отделен от газа диэлектриком. Диэлектрик препятствует прохождению постоянного тока в системе, поэтому обычно применяется гармоническое или импульсное питающее напряжение. Различают две формы горения БР – диффузную и контрагированную (филаментную). В диффузной форме светящаяся плазма заполняет межэлектродный промежуток (МЭП) с высокой степенью однородности [4], в то время как контрагированный БР состоит из узких каналов [5–7]. Также в МЭП могут наблюдаться упорядоченные светящиеся структуры [8]. Для практических приложений актуальной является задача получения именно диффузной формы разряда при атмосферном давлении, как более эффективной и удобной в применении, так как при этом воздействие плазмы распространяется равномерно на максимально широкую область. Выяснению условий перехода разряда из контрагированной формы в диффузную посвящен ряд работ [4, 9–12]. В [9] показано, что важную роль в формировании диффузного БР играет скорость нарастания напряженности электрического поля в воздушном промежутке и сопротивление внешней электрической цепи. Для двухмиллиметрового плоского воздушного промежутка при атмосферном давлении были реализованы случаи диффузного БР для скорости нарастания поля 1.1 кВ/(см нс) и контрагированного БР для скорости нарастания поля 0.1 кВ/(см нс). В данной работе скорости роста переднего фронта импульсов напряжения $\Delta E/\Delta t$ выбирались такими, чтобы в воздушном промежутке они были сравнимы с 1.1 кВ/(см нс) или больше.

Для описания распространения одиночного стримера существенным является рассмотрение двумерной или трехмерной модели [13], позволяющее получать локальное увеличение электрического поля перед головкой стримера. Контрагированные каналы возникают из одиночных лавин, стартующих с катода, тогда как при диффузной форме с катода стартует одновременно множество лавин, которые, перекрываясь, образуют единый фронт. При этом сглаживается поперечный градиент электрического поля. Интуитивно понятно, что диффузная форма не может носить исключительно лавинный характер, так как концентрация заряженных частиц в лавине слишком мала. Вместе с тем в плазме диффузного БР отсутствует контрагированность, характерная для стримерного разряда. Предполагается, что в случае диффузного БР возможно образование новой формы, волны ионизации, которая по некоторым свойствам подобна стримерной. Эту форму авторы назвали плоским стримером, прекрасно понимая, что не все ее свойства совпадают с классическим стримером. Для описания плоского стримера используется одномерное приближение.

В данной работе исследуется система плоскопараллельных электродов, один из которых покрыт диэлектриком. Рассматривается диффузный БР в воздухе при атмосферном давлении, возбуждаемый одиночным импульсом напряжения прямоугольной формы отрицательной полярности. Анализируются три случая, два из которых существенно отличаются скоростью нарастания фронта и длительностью питающего импульса напряжения, тогда как в третьем случае в модель вводится внешняя электрическая цепь.

Третий случай рассматривается для верификации расчетной модели при сравнении с экспериментом. Размеры электродов, барьера, МЭП, диэлектрическая проницаемость барьера и внешнее сопротивление были выбраны на основании экспериментальных исследований [9, 14].

Параметры первого импульса выбирались так, чтобы можно было выявить основные стадии разрядных процессов в МЭП и понять, каким образом лавинная стадия переходит в новую стадию, обеспечивающую повышенную ионизацию. Импульс напряжения характеризовался длительностью фронта 1 нс, скоростью нарастания напряжения 18 кВ/нс ($\Delta E/\Delta t$ = 152 кВ/(см нс)), длительностью 2 нс. Его длительность определялась отношением половины длины МЭП к дрейфовой скорости электронов. При таких параметрах импульса лавинно-стримерный переход (ЛСП) происходит в середине воздушного промежутка, и далее распространяется плоский двухголовочный стример. Такой импульс напряжения будем называть оптимальным.

Параметры второго импульса ближе к экспериментальным. Он характеризуется длительностью фронта 100 нс, скоростью нарастания напряжения 0.18 кВ/нс ($\Delta E/\Delta t$ = 1.52 кВ/(см нс)), длительностью 500 нс; будем называть его длительным импульсом. В работе показано, что в этих условиях распространение фронта ионизации в направлении к отрицательному электроду начинается без промежуточных стадий, аналогично тому, как распространяется классический положительный стример. В данном примере наиболее сложной стадией является замыкание волны ионизации на отрицательный электрод, при этом именно автоэмиссия играет ключевую роль. Во время данной стадии происходит наибольшее число актов ионизаций.

Целью настоящей работы является исследование структуры и свойств диффузного наносекундного БР отрицательной полярности при одиночном импульсе напряжения.

ОПИСАНИЕ КОМПЬЮТЕРНОЙ МОДЕЛИ

Моделирование диффузного БР проводится в одномерной постановке. Рассматривается плоский конденсатор, ось Ox направлена перпендикулярно его обкладкам O, B (рис. 1а). Расстояние OA занимает твердый диэлектрический барьер с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon = 2$ (для третьего импульса $\varepsilon = 9$), AB – воздух. Толщина барьера – 0.5 мм, длина воздушной части МЭП – 1 мм (для третьего импульса – 2 и 1 мм соответственно).

К обкладкам конденсатора прикладывается симметричный униполярный импульс напряжения амплитудой U_0 = 12 кВ (рис. 1б). Длительности фронтов импульса t_2 и $t_5 - t_3$, определяемые как время изменения напряжения от нуля до U_0, выбирались равными 1 нс (для оптимального импульса-I) и 100 нс (для длительного импульса-II и расчета модели вместе с сопротивлением внешней цепи-III). При этом скорость роста фронта была 18 и 0.18 кВ/нс, а длительность импульса составляла 2 и 500 нс соответственно. Длительность импульса $t_4 - t_1$ определяется как время, при котором напряжение больше 0.5 U_0.

Ряд работ [1, 5, 13–15] указывают на стримерный механизм возникновения БР и возможность его описания в рамках модели, включающей в себя уравнения переноса с дрейфовым потоком под действием электрической силы (Нернста–Планка) и уравнения электростатики. Принимая это во внимание, рассмотрим систему уравнений:

$$\Delta\left(\varepsilon\varepsilon_0\varphi\right) = 0, \quad \mathbf{E} = -\nabla\varphi, \quad x \in OA, \tag{1}$$

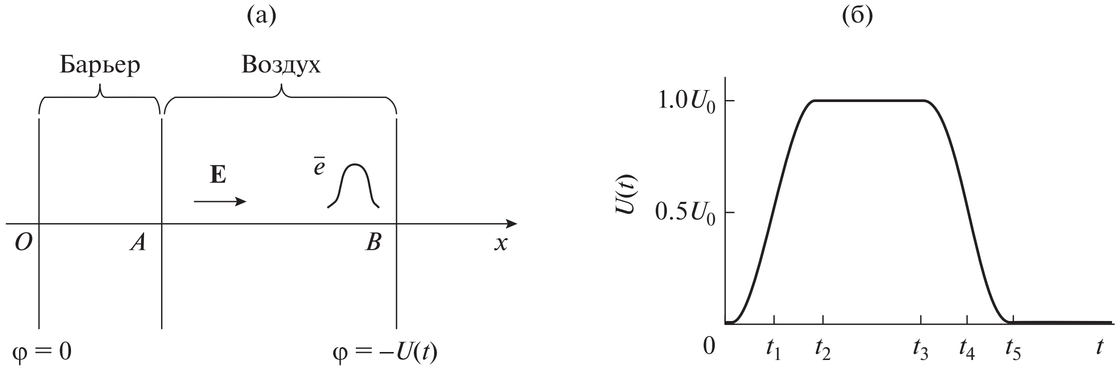


Рис. 1. Схема межэлектродного промежутка (а) и форма импульса напряжения (б).

$$-\Delta(\varepsilon_0\varphi) = |e|\left(-n_e - n_n + n_p\right),\quad \mathbf{E} = -\nabla\varphi,\quad x \in AB, \tag{2}$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla\left(-D_i\nabla n_i + z_i\mu_i n_i\mathbf{E}\right) = Q_i,\quad i = e, n, p,\quad x \in AB, \tag{3}$$

$$Q_e = \left(\alpha_{\text{ion}} - \alpha_{\text{att}}\right)n_e - C_{ei}n_e n_p + \alpha_{\text{det}}n_n + lcn_{\text{ph}}, \tag{4}$$

$$Q_p = \alpha_{\text{ion}}n_e - C_{ei}n_e n_p - C_{ii}n_p n_n + lcn_{\text{ph}}, \tag{5}$$

$$Q_n = \alpha_{\text{att}}n_e - C_{ii}n_p n_n - \alpha_{\text{det}}n_n. \tag{6}$$

В диэлектрике OA решается уравнение Лапласа (1), где φ – потенциал, $\mathbf{E}$ – вектор напряженности электрического поля, ε – относительная диэлектрическая проницаемость, ε_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума. На отрезке AB (воздух) решается уравнение Пуассона (2) и уравнения Нернста–Планка для каждого типа носителей заряда (3). В качестве носителей заряда учитываются электроны и "усредненные" для воздуха отрицательные и положительные ионы. Величины, относящиеся к электронам, отрицательным и положительным ионам, обозначаются соответственно индексами e, n, p; $|e|$ – модуль элементарного заряда, n_i – концентрация i-го типа частиц. Учитывается вклад диффузии в поток частиц (с коэффициентом диффузии D_i) и миграция под действием электрического поля $z_i\mu_i n_i\mathbf{E}$, где $z_i = \pm 1$ – заряд частицы, μ_i – ее подвижность. В (4)–(6) Q_i – функции источников, учитывающие процессы ионизации, рекомбинации, прилипания, отлипания и фотоионизации, α_{ion} – частота ударной ионизации, α_{att} – частота прилипания, C_{ei} – коэффициент электрон-ионной рекомбинации, α_{det} – частота отлипания, C_{ii} – коэффициент ион-ионной рекомбинации. Концентрация фотонов находится из уравнения для фотоионизации [16–18]

$$-\Delta n_{\text{ph}} = -l^2 n_{\text{ph}} + g\frac{5l}{c}\alpha_{\text{ion}}n_e, \tag{7}$$

где n_{ph} – концентрация фотонов, c – скорость света, $g = 10^{-6}$ – коэффициент эффективности фотоизлучения, $l = 4500$ 1/м – коэффициент поглощения фотоизлучения. Уравнение (7) – уравнение переноса фотонов, которые появляются в области сильной ударной ионизации, поглощаются средой, рассеиваются и двигаются со скоростью света. Коэффициенты для транспортных уравнений (3)–(7) приведены в [16, 17, 19, 20].

Из вторичных процессов, кроме фотоионизации, рассматривалась автоэмиссия с поверхности электрода. До начала замыкания напряженность поля на катоде невелика и автоэмиссионных затравочных электронов гораздо меньше, чем фотоионизационных. Но при расстоянии между положительной волной ионизации и катодом порядка трех длин пробега электрона фотоны не успевают поглощаться воздухом и производить необходимое количество электронов. В это же время на катоде значительно повышена напряженность электрического поля, и электроны интенсивно выходят из катода в среду, делая замыкание волны ионизации возможным. Используется оригинальное выражение для плотности тока $\mathbf{j}$ квадратичной автоэмиссии, направленной в сторону воздуха:

$$\mathbf{j}_e = -P\mu_e|\mathbf{E}|^2\,\theta\left(\mathbf{E}\mathbf{n}_B\right)\mathbf{n}_B, \tag{8}$$

где $\mathbf{n}_B$ – нормаль на границе B, направленная внутрь электрода, $\theta(\mathbf{E}\mathbf{n}_B)$ – функция Хевисайда, ее аргументом является составляющая электрического поля, нормальная границе B электрода. В модели автоэмиссионный поток отличен от нуля, если электрическое поле направлено вдоль указанной нормали, P – коэффициент интенсивности эмиссии, использовалось его значение 6×10^8 м$^{-2}$ В$^{-1}$. Данное значение точно неизвестно и подбиралось так, чтобы автоэмиссия не искажала лавинную стадию разряда. В экспериментах без предыонизации время ожидания затравочного электрона может быть заметным, следовательно, автоэмиссия не должна быть слишком интенсивной. Выбранное приближение для автоэмиссии имеет квадратичную зависимость от напряженности электрического поля, так как вероятность выхода электрона из металла предполагается постоянной. Это самое простое допущение, которое кажется эффективным при недостатке информации о состоянии границы воздух–металл. Авторы понимают, что зависимость (8) тока эмиссии от электрического поля, строго говоря, не точна: кроме электрического поля есть и другие причины выхода электрона из металла в воздух, а именно, вторичная ион-электронная эмиссия, фотоэффект. Однако учет дополнительных явлений затруднителен, поскольку неизвестны зависимости эмиссий электронов от данных факторов. Также проверялось, что учет дополнительных эффектов, влияющих на автоэмиссию, не может существенно повлиять на результаты решения, поскольку эмиссия электронов является второстепенным эффектом по отношению к процессу ионизации. Авторами проведен ряд численных экспериментов с различными функциями автоэмиссии, которые показали, что решение не чувствительно к изменению интенсивности автоэмиссии на порядок. При увеличении интенсивности автоэмиссии плоский фронт ионизации лишь незначительно ускорялся при замыкании положительной волны ионизации.

На электродах OB задается напряжение $-U(t)$, рассматривается отрицательная полярность непокрытого диэлектриком электрода B. На границе A диэлектрик–воздух рассчитывается скачок напряженности поля и учитывается поверхностный заряд σ:

$$\varepsilon\varepsilon_0\left(\mathbf{E}\mathbf{n}_A\right)\big|_{A-}-\varepsilon_0\left(\mathbf{E}\mathbf{n}_A\right)\big|_{A+}=\sigma,$$

где $\mathbf{n}_A$ – вектор нормали на границе A, направленный внутрь барьера.

Расчет поверхностного заряда производится с помощью закона сохранения заряда в предположении, что все заряженные частицы, попавшие на поверхность диэлектрика, остаются на ней:

$$\frac{\partial\sigma}{\partial t}=|e|\sum_{i=e,n,p}\left(\mathbf{E}\mathbf{n}_A\right)\mu_i n_i\theta\left(z_i\mathbf{E}\mathbf{n}_A\right).$$

Для уравнений Нерста–Планка (3) используются граничные условия на поток $\mathbf{J}_i$:

$$\mathbf{J}_i\big|_{A,B}=\mu_i n_i\theta\left(z_i\mathbf{E}\mathbf{n}_{A,B}\right)\left(z_i\mathbf{E}\mathbf{n}_{A,B}\right)\mathbf{n}_{A,B},\quad i=n,p,$$

$$\mathbf{J}_e\big|_A=\mu_e n_e\theta\left(-\mathbf{E}\mathbf{n}_{A,B}\right)\left(-\mathbf{E}\mathbf{n}_{A,B}\right)\mathbf{n}_A,$$

$$\mathbf{J}_e\big|_B=\mu_e n_e\theta\left(-\mathbf{E}\mathbf{n}_B\right)\left(-\mathbf{E}\mathbf{n}_B\right)\mathbf{n}_B-$$
$$-P\mu_e|\mathbf{E}|^2\theta\left(\mathbf{E}\mathbf{n}_B\right)\mathbf{n}_B.$$

Это условия на свободный выход из воздуха всех трех сортов заряженных частиц (учитывается направление дрейфового потока), однако для электронов к граничному условию выхода на электроде B добавляется автоэмиссионный поток (8). Для фотонов в точках A, B задана нулевая концентрация:

$$n_{\mathrm{ph}}\big|_{A,B}=0.$$

Начальное распределение электронов задается нормальным распределением с максимумом при координате 1.49 мм вблизи катода B и среднеквадратичным отклонением 0.01 мм (схематично показано на рис. 1а в виде гауссова колокола), начальные концентрации всех остальных частиц равны нулю. Начальное распределение электронов – плоский приэлектродный слой с нормальным поперечным распределением, максимум концентрации – 10^{12} м$^{-3}$. Начальные концентрации ионов на три порядка меньше, квазинейтральность не соблюдена, но, по сути, заряд в начальный момент времени мал и практически не влияет на поле в воздухе. Подобный плоский слой электронов может быть создан, например, за счет автоэмиссии.

Задача решается методом конечных элементов с помощью Comsol Multiphysics. Моделирование требует высокого качества сетки. Для построения сетки использовался критерий сеточной устойчивости – число Пекле

$$P_i=\frac{h|\mathbf{E}|\mu_i}{D_i},$$

которое для элемента сетки размером h не должно быть больше двух.

Используется около 470 тысяч линейных элементов, к границам воздушного промежутка сетка сгущается. Это связано с тем, что положительная головка плоского стримера перед замыканием на катоде создает высокую напряженность электрического поля, существенно повышая число Пекле.

АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ

Принято противопоставлять диффузную форму разряда стримерной, имея в виду, что стримерная структура – это филаментная 3D-структура. Однако в результате одномерного моделирования диффузного БР получена структура разряда, подобная известной структуре стримеров: высокая степень ионизации, снижение напряженности электрического поля в плазме за плоским фронтом волны ионизации. Такой объект авторами назван плоским или одномерным стримером. Его свойства частично совпадают со свойствами трехмерного стримера, но имеются и отличия. Плоский стример может быть получен в случае синхронного движения множества развивающихся электронных лавин с последующим лавинно-стримерным переходом.

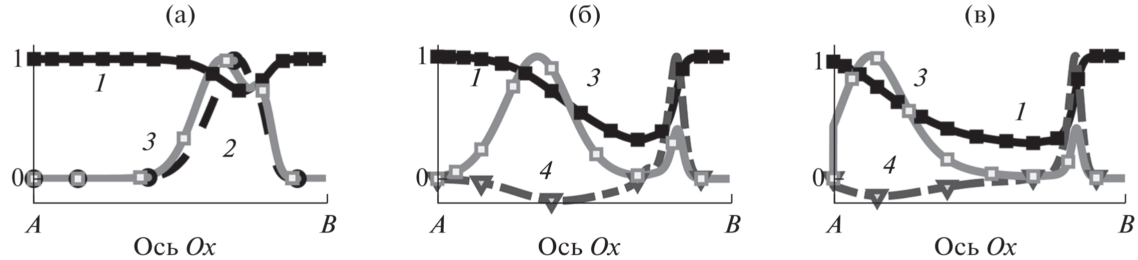


Рис. 2. Нормированные распределения величин вдоль воздушного промежутка *AB* в разные моменты времени: (а) – 1.2 нс, (б) – 1.3, (в) – 1.34; *1* – напряженность электрического поля, *2* – концентрация электронов, *3* – интенсивность ударной ионизации, *4* – объемный заряд.

Выделенные стадии разряда приведены на рис. 2. Это нормированные на свой максимум пространственные распределения основных расчетных величин вдоль воздушного промежутка *AB* в разные моменты времени. Расстояние *AB* равно 1 мм. В точке *B* (к обкладке конденсатора) прикладывается напряжение $-U(t)$, в точке *A* находится диэлектрический барьер, направление электрического поля показано стрелкой на рис. 1а. Кривая *1* на рис. 2 соответствует напряженности электрического поля в МЭП, *2* – концентрации электронов. При ионизации газа на первом этапе лавинного процесса гауссов профиль повышенной концентрации электронов распространяется в однородном электрическом поле с постоянной скоростью, равной произведению подвижности электронов на напряженность поля. Однако уже на этой стадии происходит небольшое разделение заряда: электроны движутся быстрее положительных ионов. Концентрация заряженных частиц быстро возрастает и к моменту времени 1.2 нс (рис. 2а) достигает значения 10^{18} м$^{-3}$. Этого достаточно, чтобы электрическое поле в проводящем центре лавины несколько понизилось, а перед ней и за ней возросло, что привело к смещению центров ионизации на границы заряженной области (*3* на рис. 2а). Этот момент времени соответствует ЛСП.

Далее (рис. 2б, 2в) квазинейтральная центральная часть ионизованной области остается практически неподвижной, а с ускорением движутся левая и правая разноименно заряженные границы проводящей области, образуя две разнонаправленные волны ионизации (кривая *4* – суммарный объемный заряд). Таким образом, формируются отрицательная и положительная головки плоского двухголовочного стримера. Быстрее, как и в случае классического стримера, движется отрицательно заряженная граница, которая в момент времени 1.34 нс достигает поверхности диэлектрика, при этом максимум поля на ней относительно невысокий – всего 146 кВ/см. Это событие будем называть замыканием отрицательной головки (ЗОГ). Положительная головка начинает движение несколько позже, и в момент замыкания положительной головки (ЗПГ) на катод (1.94 нс) поле достигает значительно более высокого уровня – 8 МВ/см. При недостатке затравочных электронов положительная головка повышает электрическое поле перед собой, что вызывает существенный рост тока эмиссии на катоде.

Основными характеристиками, получаемыми в эксперименте, являются осциллограммы тока и напряжения БР. На рис. 3 показаны нормированные временны́е зависимости рассчитанных величин. Характерные особенности (рост, перегибы, пересечения) этих зависимостей позволяют идентифицировать ключевые стадии и упрощают анализ БР. Ток, поверхностный заряд, напряжение и максимальное поле нормируются на свой максимум. Среднее поле нормируется на поле в воздухе без учета объемных и поверхностных зарядов. Максимальное значение электрического поля определяется суперпозицией внешнего электрического поля и собственного поля объемного заряда. Стрелками на графике указаны моменты времени, соответствующие различным стадиям БР, показанным на рис. 2. Начальная лавинная стадия характеризуется малым объемным зарядом, не искажающим внешнее электрическое поле, что видно на графике до момента времени 1.2 нс, до которого форма импульса напряжения полностью совпадает с изменением средней напряженности поля в промежутке. После ЛСП эти графики расходятся, процесс переходит в стримерную стадию и происходит формирование двухголовочного плоского стримера. Отметим также, что на лавинной стадии ток разряда практически отсутствует, поскольку концентрация заряженных частиц очень мала. В стримерной стадии разряда концентрации электронов и ионов стремительно возрастают (на девять порядков).

Отрицательная головка распространяется быстрее положительной, поскольку затравочные электроны находятся в самой головке, и в момент 1.34 нс происходит замыкание отрицательной головки на поверхность диэлектрика. При замыкании резко искажается электрическое поле, что

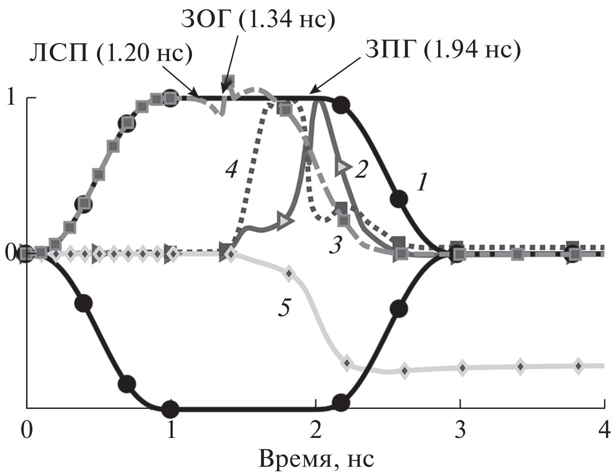


Рис. 3. Оптимальный импульс напряжения; осциллограммы нормированных величин: *1* – напряжение на электродах; *2* – ток через БР; *3*, *4* – средняя и максимальная по модулю напряженности электрического поля в межэлектродном промежутке; *5* – плотность поверхностного заряда на диэлектрике.

приводит к появлению сильного тока смещения, на осциллограмме тока наблюдается первый скачок. После этого на диэлектрике начинает накапливаться поверхностный заряд и в МЭП остается одноголовочный плоский стример с положительной головкой. При этом наблюдается быстрый рост напряженности поля перед головкой плоского стримера вместе с ростом тока смещения. Повышение максимального поля и заряда соответствует приближению головки к поверхности катода и быстрому росту катодного тока эмиссии. Однако зарядка диэлектрика некоторое время идет относительно медленно, так как для этого необходим высокий ток ионов и электронов вблизи диэлектрика. Далее происходит распространение и частичное замыкание положительной головки. Полное замыкание головки на катод происходит в момент 1.94 нс, что близко к максимуму тока. Замыкание положительной головки также приводит к резкому изменению тока смещения, в данном случае ток на короткое время спадает. Зарядка поверхности диэлектрика способствует снижению средней и максимальной напряженности поля в воздушном промежутке, что приводит к спаду тока. В момент времени 2.25 нс происходит третий всплеск максимума поля, при этом уменьшается ионный ток через поверхность катода, а также начинается задний фронт импульса напряжения. Электроны и ионы не успевают подстроиться под новое значение напряженности поля. В результате максимум поля на короткое время возрастает. К моменту начала заднего фронта импульса воздушный промежуток все еще существенно ионизован. Поэтому, несмотря на высокую плотность поверхностного заряда на заднем фронте импульса напряжения, электрическое поле в воздушном промежутке недостаточно велико и лавинно-стримерных процессов в МЭП не наблюдается. Обратного импульса тока при отключении напряжения нет. Реакция на отключение может возникнуть только при увеличении длительности импульса до величины, необходимой для существенного снижения проводимости воздушного промежутка.

Проведенный анализ разрядных процессов при оптимальной длительности импульса позволил выявить двухголовочную структуру плоского стримера. При этом длительность импульса должна быть равна отношению длины МЭП к скорости движения электронов $t_4 - t_1 \cong \dfrac{l_{AB}}{b_e|\mathbf{E}|}$. Однако в реальных установках столь короткие фронты импульсов напряжения получить невозможно, обычно достижимые длительности фронта и длительность самого импульса напряжения на порядки больше. В этих условиях следует ожидать несколько иной структуры разрядных процессов.

Проанализируем разрядные процессы для импульса с длительностью переднего фронта 0.1 мкс и длительностью импульса 0.5 мкс. Амплитуда оставалась прежней – 12 кВ. В этом случае затравочный пакет электронов распространяется до поверхности диэлектрика на медленно растущем переднем фронте импульса напряжения в изменяющемся электрическом поле. Процессы ионизации начинаются с задержкой к 55 нс, когда среднее поле в ячейке достигнет критической величины. За это время фронт затравочных электронов успевает пройти расстояние, равное длине МЭП, и вся цепочка событий (лавина, ЛСП) не успевает развиться, поэтому к поверхности диэлектрика приходит затравочный пакет электронов начальной плотности.

Таким образом, разрядные процессы начинаются с формирования волны ионизации, которая распространяется от поверхности диэлектрика к катоду (рис. 4а). Обратная волна ионизации снижает напряженность поля в плазменном канале. Ее скорость очень высока – порядка 10^6 м/с. Волна ионизации резко повышает концентрацию заряженных частиц до 10^{20} м$^{-3}$ и создает проводящий канал с коротким передним фронтом. Это образование идентично отраженному положительному стримеру [16], имеющему головку плоской формы. На рис. 4б показан развитой положительный плоский стример: высокая концентрация заряженных частиц в канале и на головке, фоновая – перед головкой, в канале плоского стримера электрическое поле сильно понижено, а перед ним – повышено. До замыкания головки на катод ток практически отсутствует.

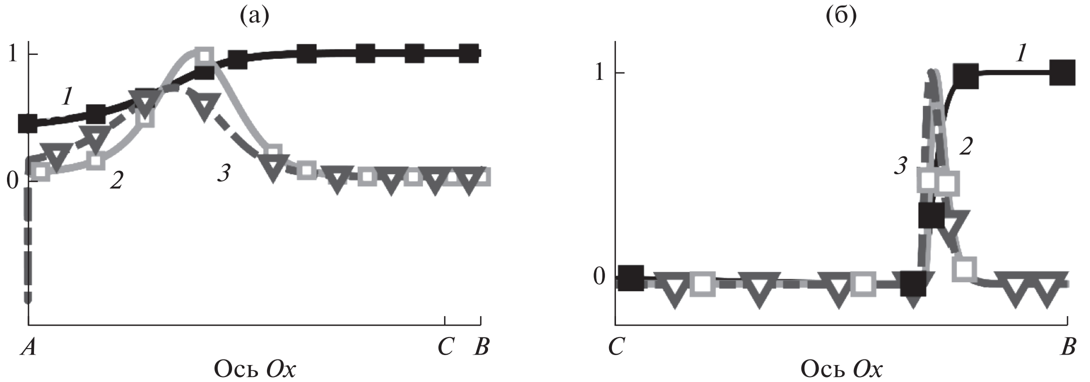


Рис. 4. Различные стадии формирования отраженной волны ионизации: (а) – 55 нс, возникновение отраженной волны ионизации от поверхности диэлектрика; (б) – 56 нс, развитие отраженной волны ионизации (растянут масштаб по оси Ox); *1* – напряженность электрического поля, *2* – интенсивность ударной ионизации, *3* – объемный заряд; точка *C* имеет координату $x = 1.42$ мм.

На рис. 5 видно, что в моменты времени 55–56 нс рассмотренные выше процессы приводят к стремительному росту напряженности поля перед головкой плоского стримера, к быстрой ионизации МЭП, сопровождающейся ростом катодного тока и накоплением поверхностного заряда на диэлектрике. Это приводит к экранированию поля в воздухе зарядом на диэлектрике, вследствие чего снижается средняя напряженность поля в воздушном промежутке и прекращаются процессы ионизации. Замыкание головки обеспечивается током эмиссии. В момент замыкания головки плоского стримера на катод импульс тока достигает максимума.

При указанных значениях параметров разрядные процессы завершаются на коротком промежуточном участке переднего фронта импульса напряжения. Далее во время действия импульса воздушный промежуток остается существенно ионизированным, однако среднее поле сильно подавляется полем заряженного диэлектрика и ток быстро снижается. Рекомбинация плазмы происходит сравнительно медленно и к моменту отключения напряжения степень ионизации воздушного промежутка все еще очень высока – порядка 10^{19} м$^{-3}$.

На заднем фронте импульса напряжения средняя напряженность поля в воздухе изменяет знак, так как доминирующим становится поле поверхностного заряда на диэлектрике. Поэтому на исходе заднего фронта вновь возникает кратковременная волна ионизации, происходящая в ионизированном газе и повышающая проводимость МЭП на порядок. Это приводит к импульсу тока противоположной полярности – обратному импульсу (ОИ) (рис. 5).

На рис. 6 приведена зависимость концентраций электронов, положительных и отрицательных ионов от времени действия импульса. После ЛСП концентрации на переднем фронте импульса возрастают от фоновых до значений 10^{20} м$^{-3}$, характерных для стримерной формы разряда, и высокая концентрация заряженных частиц в газе сохраняется достаточно долго. За время импульса концентрация электронов и ионов за счет рекомбинации снижается не более чем на порядок. Поэтому разрядные процессы при отключении напряжения происходят в ионизированном газе и развиваются иначе, чем в исходном состоянии. Как видно из рис. 5, импульс тока при отключении напряжения не имеет длительного заднего фронта. Тем не менее плоский стример, возникающий на заднем фронте импульса, вновь повышает концентрацию электронов и ионов до уровня 10^{20} м$^{-3}$. Таким образом, в БР кратковременные разрядные процессы, протекающие на переднем и заднем фронте импульса напряжения, образуют в МЭП относительно долгоживу-

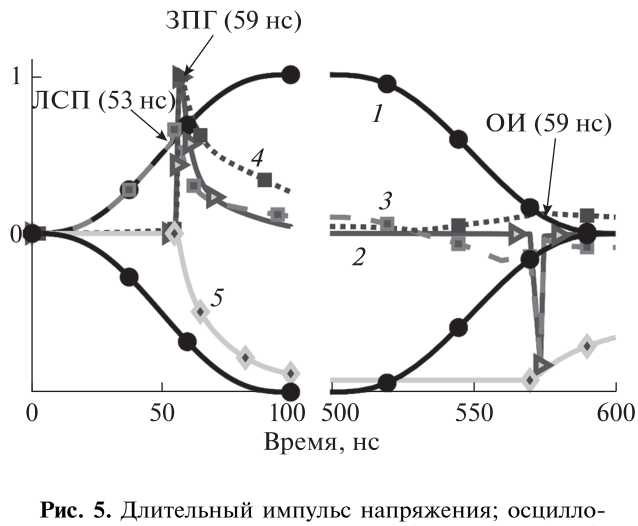


Рис. 5. Длительный импульс напряжения; осциллограммы нормированных величин: *1*–*5* – как на рис. 3.

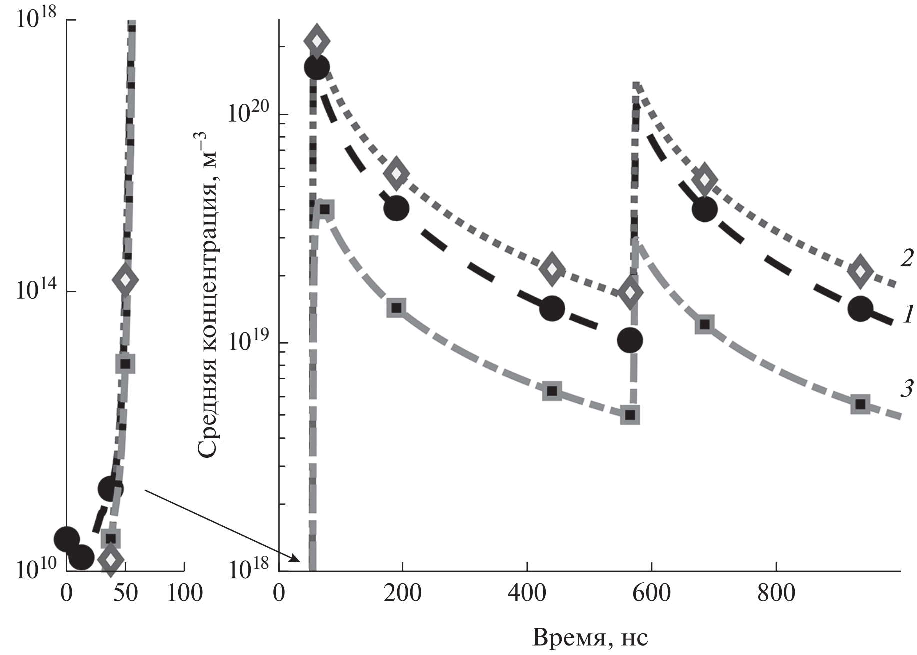


Рис. 6. Зависимость средних в межэлектродном промежутке концентраций электронов (*1*), положительных (*2*) и отрицательных (*3*) ионов от времени действия импульса напряжения.

щую плазму. Отлипание электронов от отрицательных ионов практически не изменяет концентрацию электронов: за 100 нс от отрицательных ионов (10^{19} м$^{-3}$) отлипает около 10^{17} м$^{-3}$ электронов при частоте отлипания 0.1 мкс$^{-1}$, тогда как концентрация электронов при этом более 10^{19} м$^{-3}$. Это значит, что отлипание не играет существенной роли в наносекундных импульсах напряжения. Однако отлипание влияет на процессы релаксации плазмы при длительностях импульса напряжения более 1 мкс.

В рассмотренных случаях не учитывалось сопротивление электрической цепи, питающей БР, поэтому токи в системе оказывались более высокими, чем наблюдаются в эксперименте, – до 150 и 3 кА в случае оптимального и длительного импульсов соответственно. Однако экспериментальные исследования [9, 10, 14] показали, что горение БР в диффузной или контрагированной форме сильно зависит от последовательно включенного с ячейкой БР электрического сопротивления, которое будет ограничивать в ней ток. Поэтому для количественного сравнения результатов расчетов с экспериментальными измерениями к описанной модели необходимо добавить внешнюю электрическую цепь: тогда напряжение $U(t)$ будет задаваться не на электродах, как ранее, а на источнике напряжения, подключенном последовательно к электродам через сопротивление 100 Ом и индуктивность 1 нГн. Электрическое сопротивление, параметры импульса $U(t)$, геометрия и материал барьера взяты из эксперимента [14] (рис. 3.4а), а индуктивность выбрана как типовая для подводящих проводов с длиной около 10 см и диаметром около 1 мм. Результаты расчетов с учетом внешнего ограничивающего сопротивления приведены на рис. 7. Рассчитанная осциллограмма тока имеет те же особенности, что и экспериментальная: присутствуют два одиночных импульса тока на переднем и заднем фронтах импульса напряжения. Импульс тока на начальной стадии характеризуется небольшим током смещения и затем резким ростом тока проводимости, если МЭП предварительно ионизирован, то к току смещения добавляется небольшой по величине ток проводимости несамостоятельного разряда. Амплитуда тока на переднем фронте импульса в модели – 16 А, в эксперименте она доходит до 10 А, амплитуда тока на заднем фронте – 5.5 и 7 А в модели и эксперименте соответственно. Длительность импульсов тока в обоих случаях – около 100 нс. Учитывая приближения, принятые в модели, такое соответствие кажется вполне удовлетворительным. Амплитуда первого импульса тока оказалась несколько завышенной, возможно, из-за того, что в модели в начальный момент времени воздушный промежуток не ионизирован, барьер полностью нейтрален. А в эксперименте [14] представлены результаты для импульса напряжения уже после некоторого числа предварительных импульсов.

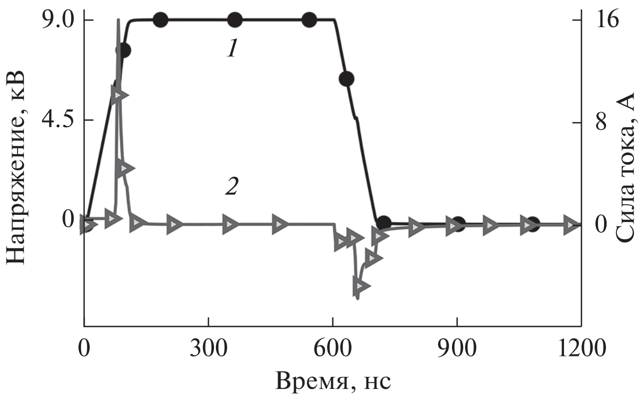


Рис. 7. Импульсы напряжения (*1*) и тока (*2*) в условиях, близких к эксперименту.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено численное моделирование диффузного БР в системе плоских электродов в рамках одномерной модели. Получены и описаны одномерные проводящие структуры, подобные стримерам, имеющие некоторые характерные черты: электрическое поле перед ионизированной средой повышено и однородно вплоть до границы воздушного промежутка, внутри канала напряженность электрического поля существенно понижена, границы проводящей структуры распространяются по механизму волны ионизации. Эти структуры условно названы плоскими стримерами.

На примере оптимального импульса напряжения (с длительностью переднего фронта меньше времени пересечения электронами МЭП) были выявлены все основные стадии БР: лавинная, ЛСП, двухголовочный плоский стример, замыкание головок плоского стримера на электроды. А также установлена взаимосвязь выявленных стадий с основными интегральными характеристиками процесса (током, средней и максимальной по модулю напряженностями электрического поля в МЭП, плотностью поверхностного заряда на диэлектрике).

Для более длительных импульсов напряжения, обычно используемых в экспериментах, структура лавинно-стримерных процессов в ячейке иная: в этом случае затравочный пакет электронов распространяется без ионизации до поверхности диэлектрика, а ионизация МЭП происходит при развитии в воздухе отраженной волны ионизации.

Кратковременные ионизационные процессы развиваются на масштабе наносекунд. Поэтому для кратковременного оптимального импульса напряжения импульс тока развивается после завершения переднего фронта, в то время как для более длительного импульса, используемого в экспериментах, — только на переднем и заднем фронтах. При этом в обоих случаях плазма в воздушном промежутке сохраняется значительно дольше — в течение десятков и сотен микросекунд, и существенно влияет как на процессы ионизации, так и на результирующие импульсы тока.

Показано, что существенное влияние на амплитуду тока в МЭП оказывают параметры внешней электрической цепи. Учет внешнего сопротивления и индуктивности проводов в модели позволил получить осциллограммы тока, количественно близкие к экспериментальным. Стоит отметить, что при наличии внешней цепи модель гораздо менее требовательна к расчетной сетке и моделирование занимает на порядок меньше времени, чем без учета сопротивления. Это объясняется меньшими значениями напряженности электрического поля в разрядной ячейке из-за перераспределения напряжений между электродами и внешней цепью. Таким образом, внешняя цепь препятствует развитию БР.

Представлены графики интегральных расчетных величин, и показано, что их применение к анализу результатов оказалось крайне удобно. Такие графики позволяют установить примерные моменты времени основных разрядных процессов (ЛСП, замыкание и т.д.), не прибегая к избыточному анализу результатов их структуры. Также такой набор графиков содержит в себе осциллограммы тока и напряжения на электродах, что упрощает сравнение с экспериментом и дополняет его.

Исследования проведены с использованием оборудования ресурсного центра Научного парка СПбГУ “Вычислительный центр”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kogelschatz U.* Dielectric-Barrier Discharges: Their History, Discharge Physics, and Industrial Applications // Plasma Chem. Plasma Process. 2003. V. 23. № 1. P. 16.
2. *Benard N., Noté P., Moreau E.* Highly Time-Resolved Investigation of the Electric Wind Caused by Surface DBD at Various AC Frequencies // J. Electrostat. 2017. V. 88. P. 41.
3. *Xu D., Xu Yu., Cui Q. et al.* Cold Atmospheric Plasma as a Potential Tool for Multiple Myeloma Treatment // Oncotarget. 2018. V. 9. № 26. P. 18002.
4. *Малашин М.В., Мошкунов С.И., Хомич В.Ю., Шершунова Е.А.* Об однородности диффузного барьерного разряда в атмосферном воздухе между плоскими цилиндрическими электродами // Письма в ЖТФ. 2015. Т. 41. № 9. С. 54.
5. *Steinle G., Neundorf D., Hiller W., Pietralla M.* Two-Dimensional Simulation of Filaments in Barrier Discharges // J. Phys. D. Appl. Phys. 1999. V. 32. № 12. P. 1350.
6. *Iqbal M.M., Turner M.M.* Three-Dimensional Fluid Model for Atmospheric Pressure Dielectric Barrier

Discharge Plasma // Plasma Process. Polym. 2015. V. 12. № 10. P. 1104.

7. *Скворцов В.В.* Средняя мощность, вносимая в барьерный разряд пульсирующим электрическим током // ТВТ. 2010. Т. 48. № 1. С. 9.
8. *Ouyang J., Li B., He F., Dai D.* Nonlinear Phenomena in Dielectric Barrier Discharges: Pattern, Striation and Chaos // Plasma Sci. Technol. IOP Publishing. 2018. V. 20. № 10. P. 103002.
9. *Малашин М.В., Мошкунов С.И., Хомич В.Ю., Шершунова Е.А, Ямщиков В.А.* О возможности получения объемного диэлектрического барьерного разряда в воздухе при атмосферном давлении // Письма в ЖТФ. 2013. Т. 39. № 3. С. 252.
10. *Khomich V.Y., Malashin M.V., Moshkunov S.I. et al.* Series Circuit Resistance as Factor of DBD Mode in Air at Different Barrier Materials // IEEE Trans. Plasma Sci. 2014. V. 42. № 10. P. 3314.
11. *Ráhel' J., Sherman D.M.* The Transition from a Filamentary Dielectric Barrier Discharge to a Diffuse Barrier Discharge in Air at Atmospheric Pressure // J. Phys. D. Appl. Phys. 2005. V. 38. № 4. P. 547.
12. *Liu W., Chai M., Hu W. et al.* Generation of Atmospheric Pressure Diffuse Dielectric Barrier Discharge Based on Multiple Potentials in Air // Plasma Sci. Technol. 2019. V. 21. № 7. P. 074004.
13. *Ebert U., Montijn C., Briels T.M.P. et al.* The Multiscale Nature of Streamers // Plasma Sources Sci. Technol. 2006. V. 15. № 2. P. S118.
14. *Шершунова Е.А.* Экспериментальное исследование наносекундного барьерного разряда в атмосферном воздухе при естественной влажности. Дис. ... канд. техн. наук. СПб.: Ин-т электрофизики и электроэнергетики РАН, 2016. 128 с.
15. *Ebert U., Brau F., Derks G. et al.* Multiple Scales in Streamer Discharges, with an Emphasis on Moving Boundary Approximations // Nonlinearity. 2011. V. 24. № 1. P. C1.
16. *Самусенко А.В., Стишков Ю.К.* Электрофизические процессы в газах при воздействии сильных электрических полей. СПб.: ВВМ, 2012. 649 с.
17. *Стишков Ю.К., Самусенко А.В., Ашихмин И.А.* Коронный разряд и электрогазодинамические течения в воздухе // УФН. 2018. Т. 188. № 12. С. 1331.
18. *Luque A., Ebert U., Montijn C., Hundsdorfer W.* Photoionization in Negative Streamers: Fast Computations and Two Propagation Modes // Appl. Phys. Lett. 2007. V. 90. № 8. P. 2007.
19. *Dutton J.* A Survey of Electron Swarm Data // J. Phys. Chem. Ref. Data. 1975. V. 4. № 3. P. 577.
20. *Райзер Ю.П.* Физика газового разряда. М.: Наука, 1992. 536 с.

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР, 2021, том 59, № 1, с. 41–50

УДК 533.9.07, 533.9.08

СКОРОСТЬ И ТЕМПЕРАТУРА ПЛАЗМЕННЫХ СТРУЙ И ИХ ИЗМЕНЕНИЕ ВНОСИМЫМИ В ПЛАЗМУ ИСКУССТВЕННЫМИ ОПТИЧЕСКИМИ НЕОДНОРОДНОСТЯМИ

© 2021 г. С. В. Горячев[1], М. А. Хромов[1], Д. И. Кавыршин[1, *], Ю. М. Куликов[1], В. Ф. Чиннов[1], В. В. Щербаков[1]

[1]*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия*

**E-mail: dimakav@rambler.ru*

Поступила в редакцию 30.12.2019 г.
После доработки 24.04.2020 г.
Принята к публикации 18.06.2020 г.

Рассмотрен метод измерения скорости дозвуковых затопленных плазменных струй с неустановившимся течением, основанный на анализе движения внесенных в струю оптических неоднородностей. Источник таких неоднородностей в виде тонкого термостойкого стержня вводится в диаметральном направлении выбранного сечения струи, истекающей из выходного канала сильноточного плазмотрона постоянного тока в окружающую воздушную среду при атмосферном давлении. Плазмообразующим газом является смесь аргона с азотом, характерные числа Рейнольдса исследуемых течений составляют $\mathrm{Re}_D = 50{-}300$. Исследовано возмущающее воздействие вводимого в плазменную струю тела на две важнейшие характеристики: температуру плазмы и скорость ее движения. Методом двухпозиционной скоростной синхронной визуализации исследованы особенности ламинарного и пульсационного течения затопленных плазменных струй. Показано, что в названных условиях длина участка восстановления неразрывности течения обтекающего стержень потока с температурой 10–12 кК и скоростью 100–500 м/с незначительна и составляет несколько миллиметров. Спектральными методами выполнено измерение температуры плазмы в области наибольшего теплового возмущения, вызванного введением стержня. Наблюдаемое охлаждение плазмы сопоставлено с расчетным падением энтальпии, возникающим в связи с затратами на нагрев и абляцию материала стержня.

DOI: 10.31857/S0040364421010038

ВВЕДЕНИЕ

Генераторы низкотемпературной плазмы (ГНП) создают поток высокоионизированного квазинейтрального газа, который в ряде случаев представляет собой затопленную струю, истекающую в окружающее пространство, что позволяет причислить этот процесс к классическим задачам механики жидкости и газа.

Затопленная струя является неустойчивым нестационарным течением, которое имеет несколько стадий эволюции в масштабе, определяемом характерным размером – диаметром выходного отверстия D. Соответственно, в этом масштабе вводится и характерное число Рейнольдса $\mathrm{Re}_D = \rho UD/\mu$, где U – характерная скорость, ρ – плотность, μ – динамическая вязкость. Важной для эволюции затопленной струи представляется область среза сопла, которая является крайне чувствительной к возмущениям скорости и давления. Искусственно генерируемые возмущения (посредством вибрирующих пластин, акустических динамиков, вспомогательных впускных каналов) могут быть осевыми или спиральными, при этом их амплитуда может составлять около 0.01% от скорости U [1]. Возбуждение позволяет управлять интенсивностью процесса смешения, в отдельных случаях удается разделить затопленную турбулентную струю на два или три потока с максимальным углом раствора в 160°.

Характер неустойчивости течения определяется возмущениями, распространяющимися по газовому тракту газодинамической установки (генератору низкотемпературной плазмы), собственными частотами соплового блока, гидродинамическими возмущениями от стационарных вихрей, возникающих вследствие поворотов газового тракта, а также срывом пограничного слоя на острых кромках.

Наряду с участком среза сопла, важным элементом затопленной струи является свободный сдвиговый слой. Характеристики сдвигового слоя, такие как его средняя скорость $\bar{U}$, разница в характерных скоростях ΔU, максимум производной скорости в направлении сдвига $|\partial U/\partial y|_{\max}$ [2], начальная толщина области вытеснения и толщины области потери импульса, в значительной степени определяют характер неустойчивости (конвективная или абсолютная [3]), а также скорость ее развития (инкремент неустойчивости). Нарастание неустойчивости в сдвиговом слое носит двумерный характер (по крайней мере, на линейной стадии эволюции) [4]. Дальнейшее развитие приводит к свертыванию вихрей Кельвина–Гельмгольца, которые в случае трехмерной затопленной струи имеют тороидальную форму. Их интенсивность определяет скорости вовлечения окружающей жидкости в струю и разрушения ядра потока, форму образующихся когерентных структур в дальнем поле струи.

Затопленная струя подразделяется на несколько участков (не менее трех): начальный участок ($z/D < 6$), переходный ($6 < z/D < 20$) и основной (автомодельный, $z/D > 20$). Важным параметром является характерное число Маха M в пограничном слое, определяющее влияние сжимаемости [2].

Описанная картина эволюции существенно усложняется, если затопленная струя представляет собой термическую плазму. Существование большого разрыва для ряда термодинамических величин (плотности, температуры и т.д.) должно оказывать заметное влияние на развитие неустойчивости, а также на процесс смешения с окружающим газом.

Важным процессом является радиационное охлаждение плазмы вследствие неравновесного излучения, приводящего к быстрому охлаждению макроскопических “молей” газа и уменьшению их объема, а также равновесная рекомбинация атомов и молекул, изменяющая, в частности, среднюю молярную массу смеси. Наблюдение процесса смешения и образующихся структур в рекомбинирующей плазменной струе, а также нахождение распределения скорости представляют собой сложную задачу из-за высоких температур (приводящих к испарению частиц-маркеров и разрушению измерительного оборудования) и большой интенсивности свечения газов, исходящих из плазмотрона.

Анализ движения оптических неоднородностей в струях газа и плазмы с неустановившимся течением открывает возможности измерения скорости потока. В большинстве плазменных технологий используются относительно короткие плазменные струи протяженностью в несколько калибров выходного сопла плазмотрона с дозвуковой ($10{-}10^3$ м/с) скоростью [5–8]. В таких течениях оптическими методами (скоростная визуализация, шлирен-эффект) легко обнаруживаются естественные оптические неоднородности, обусловленные пространственной неоднородностью струи, срывными течениями в выходном сопле плазмотрона и др.

Создание искусственных оптических неоднородностей (ИОН) вносит системность в их образование и позволяет предложить принципы и алгоритм определения скорости их движения [5, 9–11]. В последние годы для создания маркеров с целью определения скорости потоков газов и плазмы развиваются новые, интересные подходы. Методика, описанная в работе [12], имеет много общего с примененным в данной работе подходом, но вместо тонкого стержня в плазменный поток инжектируется капля или струйка жидкости. Высокоскоростная диагностика с использованием метода измерения скорости по отслеживанию траекторий частиц (PTV) позволяет получить траектории и скорости частиц, на которые разделяется инжектируемая капля.

В работе [13] в плазменной струе с турбулентным течением осуществляется измерение вектора скорости потока по перемещению индуцированных короткоимпульсным лазером плазменных образований, которые служат маркерами скорости.

Важнейшей проблемой измерений скорости с использованием ИОН является обеспечение минимального возмущения исследуемого потока вносимыми в него пробными телами. Именно этому вопросу в данной статье уделено основное внимание.

Одним из способов создания ИОН является введение в струю в диаметральном направлении тонкого термостойкого стержня ($d_0 \ll D$, d_0 и D – диаметры стержня и струи соответственно), плазмотермическое разрушение которого порождает большое разнообразие крупно- и мелкомасштабных оптических неоднородностей (ОН). Для успешного определения скорости плазменных потоков при внесении в них оптических неоднородностей необходима минимизация их возмущающего действия на движущуюся плазму путем правильного выбора термостойкого материала и экспериментального установления условий, при которых скорость движения ОН может быть отождествлена со скоростью движения плазменного потока. Для цилиндрически симметричной системы сечением, в котором следует определять профиль продольной скорости движения, является ее диаметральное сечение вдоль оси струи. В рассматриваемом методе это сечение задается помещением в него источника ОН в виде тонкого стержня. Продукты испарения и абляции, возникающие на нагреваемой плазмой поверхности стержня, увлекаются плазменным потоком и образуют долгоживущие светящиеся плазменные образования (ОН), представляющие собой сублимационные облака возбужденных атомов, молекул и кластеров материала стержня и продуктов их плазмохимического взаимодействия с веществом плазмы.

В настоящей работе рассмотрен принципиальный вопрос о возмущающем воздействии на плазменную струю вводимого в нее инородного тела, а именно, на две ее важнейшие характеристики: температуру плазмы и скорость движения. Последовательно приводятся описание экспериментальной установки, результаты визуализации ОН, а также спектральный анализ теплового возмущения плазменной струи при вводе ОН. Обсуждаются результаты расчета энтальпии смеси аргона и азота в контексте проведенных экспериментов.

ОПИСАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ УСТАНОВКИ

Объектом исследования является затопленная плазменная струя, истекающая из расширяющегося выходного канала плазмотрона постоянного тока [14–16] в окружающую воздушную среду при атмосферном давлении. Плазмообразующий газ представляет собой смесь аргона с азотом в весовом соотношении 9 : 1 с полным расходом в диапазоне 1–4 г/с, ток дуги находится в диапазоне 200–400 А, напряжение горения – 40–50 В, диаметр выходного отверстия $D = 8$ мм. Характерное число Рейнольдса исследуемых течений составляет $\mathrm{Re}_D = 50–300$.

Схема введения ОН в плазменную струю и измерительные средства представлены на рис. 1. Подробно измерительная схема установки по исследованию движения ИОН описана в [17].

Графитовый стержень *2* диаметром $d = 0.7$ мм с помощью электромагнитного привода *4* на время менее 1 с вводится поперек генерируемого электродуговым плазмотроном *5* плазменного потока *1* ($D \gg d$) под прямым углом к продольной его оси и при выбранной продольной координате z, отстоящей от выходного отверстия на 5 мм. Возникающие под воздействием плазменного потока на стержень продукты испарения и абляции (атомы, молекулы и кластеры материала стержня и продукты их плазмохимического взаимодействия с веществом плазмы) увлекаются струей и образуют долгоживущие светящиеся ОН *3*.

Для обеспечения локальности в наблюдении ОН используется синхронизованная высокоскоростная двухпозиционная визуализация струи. Выбор ориентации видеокамер, масштаба изображения, кадровой частоты и экспозиции определяется протяженностью исследуемого участка струи, ее диаметром, скоростью движения и структурными особенностями ОН. ОН регистрируются двумя скоростными видеокамерами *6* и *7*, предварительно отъюстированными и синхронизированными по частоте кадров. Оптические оси камер находятся под некоторым углом θ друг к другу, пересекаются на продольной оси плазмотрона и составляют с ней прямой угол, при этом оптическая ось камеры *7* имеет прямой угол с продольной осью стержня. Расположение видеокамер по отношению к стержню обеспечивает из-

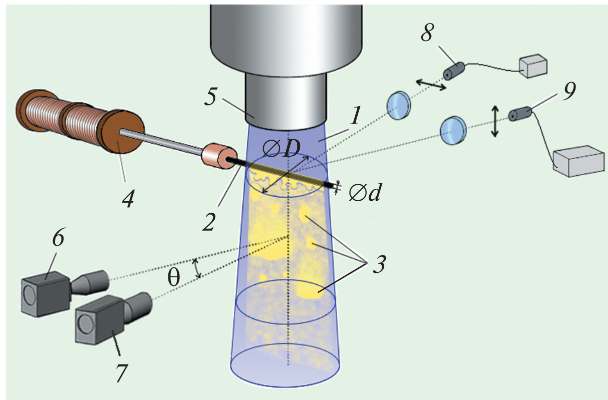


Рис. 1. Измерительный комплекс: *1* – плазменный поток, *2* – сублимирующий графитовый стержень, *3* – оптические неоднородности, *4* – система ввода–вывода стержня, *5* – плазмотрон, *6* и *7* – видеокамеры, *8* и *9* – оптоволоконные спектрометры.

мерение локальной скорости по фоторазверткам движения ОН по продольной и поперечной координатам потока. Камеры в выбранном масштабе и с требуемым пространственным разрешением выполняют покадровую стереосъемку протяженной области струи $\Delta z \gg D$ с частотой и экспозицией, определяемой светимостью неоднородностей и скоростью их движения.

Для регистрации спектров излучения плазмы используются одноканальный оптоволоконный спектрометр AvaSpec 3648 *8* с диапазоном 220–1100 нм и спектральным разрешением около 1 нм и трехканальный спектрометр AvaSpec 2048 *9* со спектральным диапазоном 220–1100 нм и разрешением 0.2–0.5 нм. Кварцевые конденсоры создают резкое изображение плазмы в масштабе 1 : 1 в плоскости входного торца световодов спектрометров, линия наблюдения которых проходит через центральную область струи. Световоды могут перемещаться вдоль оси струи, что позволяет регистрировать спектры излучения плазмы в представляющей интерес продольной плазменной координате.

Оценка длины участка восстановления исходного скоростного профиля течения, обтекающего со скоростью U цилиндрическое препятствие диаметром $d_0 \ll D$, показывает, что при скоростях течения 100–400 м/с в месте введения стержня с диаметром $d = 0.7–1.0$ мм число Рейнольдса $\mathrm{Re}_D \leq 50$. При таком его значении реализуется схема обтекания, при которой за цилиндром возможно образование циркуляционной области длиной не более одного-двух диаметров стержня [13, 18].

Таким образом, возмущающее гидродинамическое воздействие стержня на плазменный поток оказывается незначительным, и на расстоя-

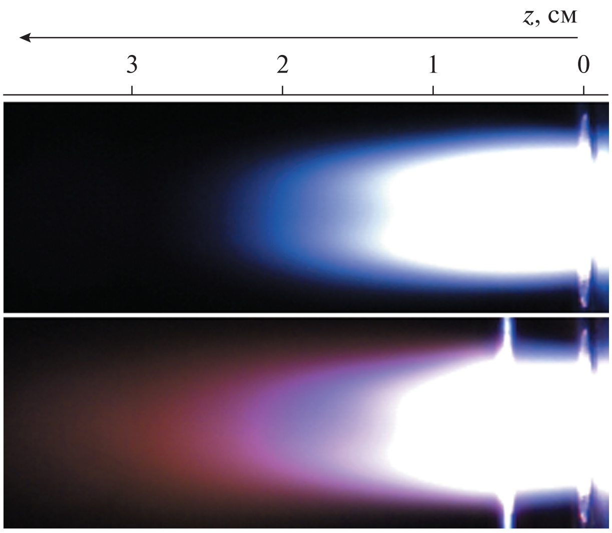


Рис. 2. Изображение начального участка плазменной струи $Ar + N_2$ с введенным стержнем (внизу) и без него при расходе смеси $G = 4$ г/с.

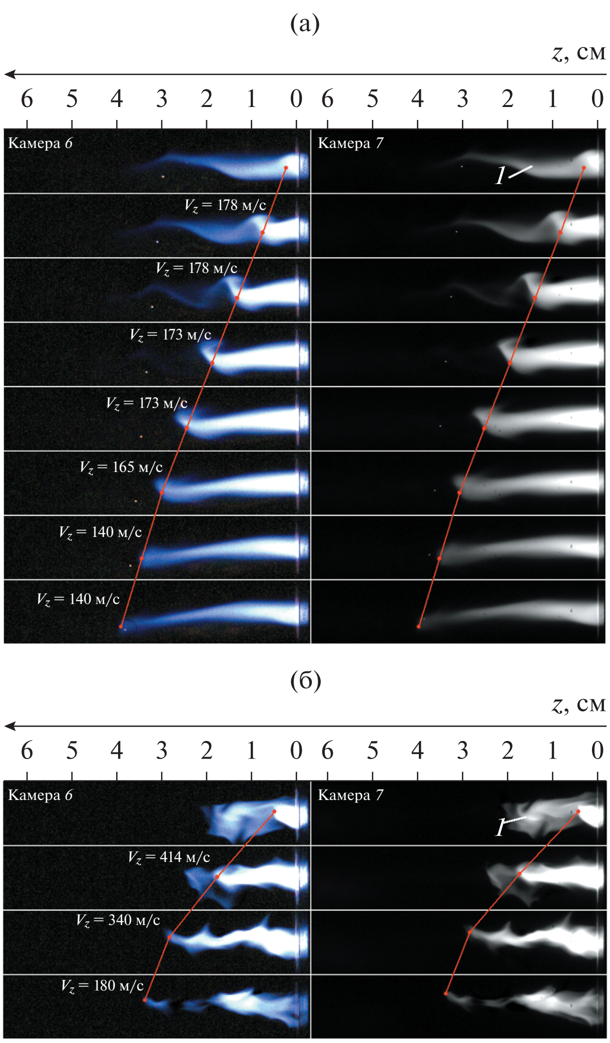


Рис. 3. Последовательность пар синхронных кадров при расходе плазмообразующего газа 1 (а) и 3 г/с в отсутствии стержня (б): *1* – плазменная струя.

ниях, удаленных от зоны возмущения на 5 мм, и далее вниз по течению не должно наблюдаться различие скоростей невозмущенной струи и струи с введенным в нее тонким стержнем. Это иллюстрирует рис. 2, на котором изображен начальный участок затопленной струи с введенным стержнем и без него. Изображения получены экспонированием 30 000 кадров при одинаковых экспозициях для обоих случаев. Заметно значительное увеличение протяженности излучающего потока с введенным в него разрушаемым стержнем.

Опыты показали, что получение устойчивых и протяженных плазменных струй легче осуществляется в смеси аргона с небольшой примесью (5–20%) азота. При дальнейшем рассмотрении использованы плазменные струи в таких смесях.

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ЗАТОПЛЕННОЙ ПЛАЗМЕННОЙ СТРУИ, ОЦЕНКИ РЕАЛИЗУЮЩИХСЯ СКОРОСТЕЙ

Примеры синхронизованной регистрации двумя камерами плазменной струи без внешних возмущений (с естественными оптическими неоднородностями) и при введении в нее графитового стержня диаметром 0.7 мм (с искусственными оптическими неоднородностями) представлены на рис. 3 и 4. Осуществлена скоростная визуализация потока аргон-азотной плазмы (без стержня), сформированного плазмотроном в двух режимах работы при расходах плазмообразующего газа G = 1 и 3 г/с, энерговкладе около 15 кВт и диаметре выходного отверстия сопла D = 8 мм. Скоростные камеры, расположенные под углом $\theta = 12°$ друг к другу, обеспечивали синхронную регистрацию кадров с частотой 3×10^4 с$^{-1}$ (камера *7*) и 6×10^4 с$^{-1}$ (камера *6*), в масштабе 1 : 7 с пространственным разрешением 140 мкм/пиксель. На рис. 3 приведены последовательности объединенных в пары синхронных кадров (для камеры *6* – каждый второй кадр) в случае режимов формирования плазменной струи с расходами 1 и 3 г/с соответственно.

Представленные последовательности кадров иллюстрируют возможность измерения локальной скорости движения плазменного потока по перемещению собственного фронта течения. В режиме работы плазмотрона с расходом плазмообразующего газа 1 г/с формируется стабильная плазменная струя протяженностью несколько калибров с ламинарным характером течения. На выходе из сопла плазма движется с продольной скоростью 178 м/с, которая на расстоянии z = = 40 мм падает до значения 140 м/с. При увеличении расхода до 3 г/с режим движения плазменного потока становится пульсационным, на приведенных кадрах продольная скорость потока на выходе из сопла составляет 414 м/с и падает до значения 180 м/с на том же пути.

СПЕКТРАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ТЕПЛОВОГО ВОЗМУЩЕНИЯ ПЛАЗМЕННОЙ СТРУИ ПРИ ВВОДЕ ОН

При внесении в плазменную струю зондирующего стержня малого диаметра происходит нагрев и последующее испарение (или абляция) его материала, сопровождающаяся возникновением ИОН. На рис. 4 представлены синхронные видеокадры оптических неоднородностей, создаваемых графитовым стержнем, при расходе плазмообразующего газа 1 г/с.

Задачей исследования являлось установление количественных изменений энтальпии (температуры) плазменной струи в области внесения в нее зондирующего (разрушающегося) стержня. Решается она путем спектрального анализа излучения плазменной струи в области, расположенной на 1–2 мм ниже координаты ввода в струю стержня. Излучение этой области проектируется кварцевым конденсором на входной торец оптоволоконного световода спектрометра AvaSpec 3648 и регистрируется с частотой 100 с$^{-1}$ и экспозицией 2 мс в течение всего цикла “ввод–неподвижное положение в центре струи–вывод стержня” длительностью около 800 мс. Синхронно с регистрацией спектров осуществляется двухпозиционная скоростная регистрация камерами *6* и *7* (рис. 1) области ввода–вывода стержня и плазменной струи на протяжении 5–6 см вниз по ее течению (рис. 4).

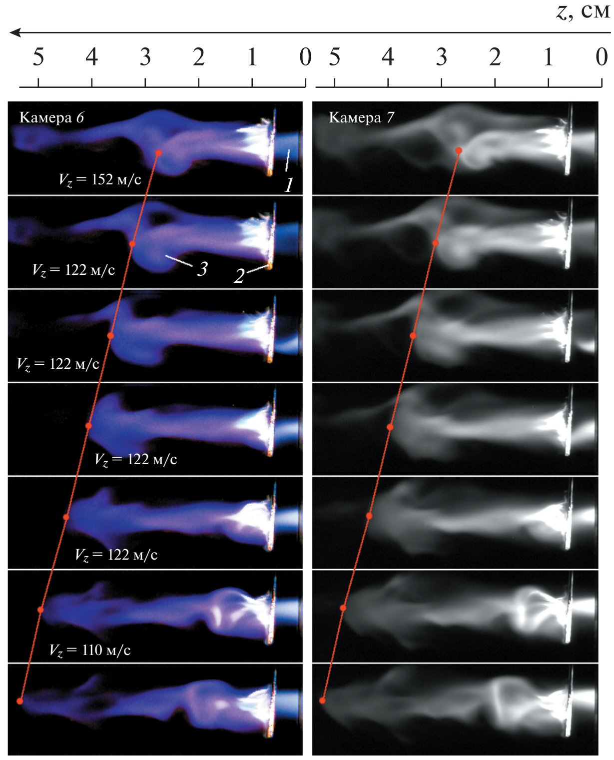


Рис. 4. Последовательности синхронных кадров с изображением ОН, создаваемых графитовым стержнем, при расходе плазмообразующего газа около 1 г/с.

Спектр излучения плазмы в этот период претерпевает изменения, отраженные на рис. 5 и 6. Параметром, характеризующим приводимые спектры, является время (мс), отсчитываемое от момента вхождения стержня в плазменную струю (устанавливается по данным скоростной синхронной визуализации). Таким образом, на рис. 5, 6 представлены спектры плазменной струи до ввода стержня, во время прохождения стержнем плазменной струи, при неподвижном стержне, погруженном в струю, и после выхода стержня из струи. Для наглядности приведенные на рисунках спектры последовательно сдвинуты друг относительно друга.

Отождествление спектров излучения, осуществляемое с помощью автоматизированной системы распознавания спектральных линий с включенной в нее базой данных NIST Lines, указывает на обилие атомных линий N I, Ar I (плазмообразующий газ), отдельных линий Cu I (материал анодного канала плазмотрона и выходного сопла), наблюдаемых на протяжении всего цикла, и множество атомных линий примесей, наблюдаемых в период нагрева стержня и его пребывания в струе. Естественно, что это, прежде всего, линии легкоионизируемых металлов, присутствующих в графите и наполнителе: резонансный дублет Na I (588.9, 589.6 нм) и резонансные линии Ca I (422.7 нм) и Ca II (393.4, 396.8 нм).

Спектр примесей был детально отождествлен при использовании трехканального спектрометра с лучшим спектральным разрешением. Помимо упомянутых и сильнейших резонансных линий Na I, Ca I и Ca II наблюдаются значительное число линий Ca I и Ca II в широком диапазоне длин волн и энергий возбуждения, а также молекулярные спектры радикала CN (переход $B^2\Sigma^+–X^2\Sigma^+$, полосы 0–0, 1–0, 0–1). По-видимому, практическое отсутствие в спектре интенсивных атомных линий C I (например, 247.8 нм) свидетельствует о быстрых процессах поверхностного горения углерода и его гетерогенной нитризации на поверхности стержня, мгновенно нагреваемого до температуры $T_w \approx 2500$ K:

$$2\text{N(г)} + \text{C(тв)} \to \text{N}_2\text{(г)} + \Delta E_{\text{dis}} + \text{C(тв)} \to$$
$$\to \text{CN(г)} + \text{N(г)}.$$

Представленные спектры излучения открывают возможности для анализа температуры плазмы в зоне ввода стержня на всех его этапах. Прежде всего, это определение температуры электронов (которая в свободной струе атмосферного давления совпадает с температурой тяжелых частиц) методом отношения интенсивностей многочисленных спектральных линий атомов Ar I и N I

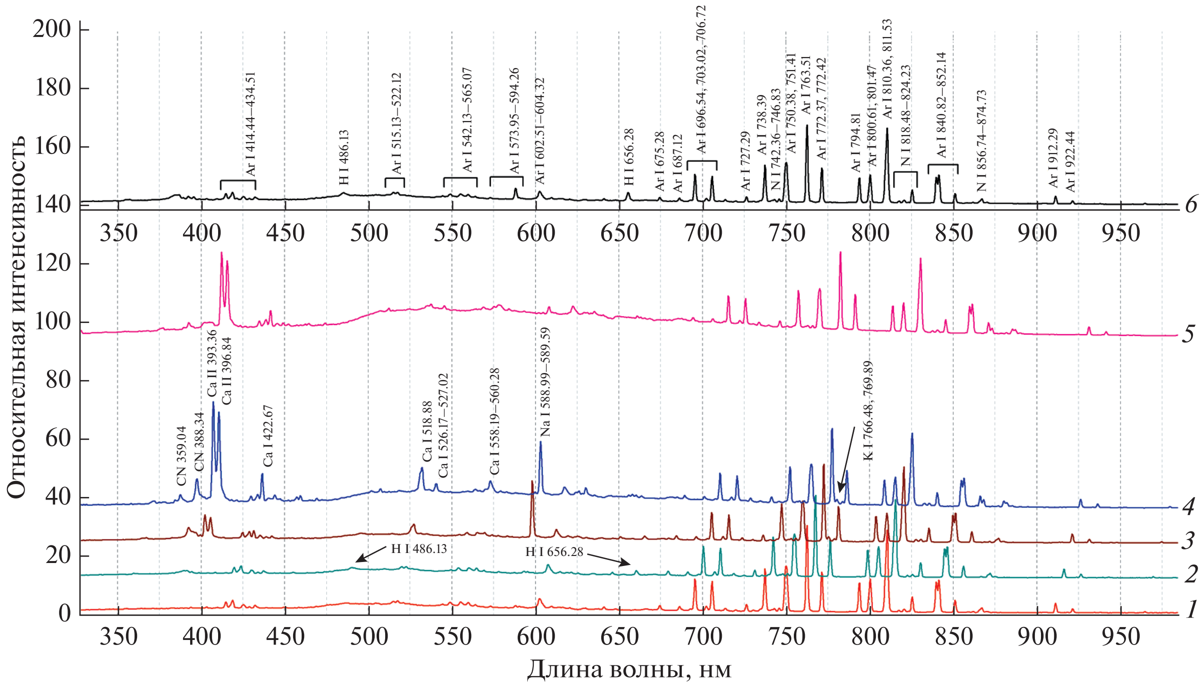


Рис. 5. Последовательность спектров излучения струи в зоне возмущения до ввода, в процессе ввода, пребывания в струе и вывода стержня: *1* – *t* = 0 мс, *2* – 50, *3* – 160, *4* – 260, *5* – 460, *6* – 640; одноканальный спектрометр AvaSpec 3648, расход – 4 г/с.

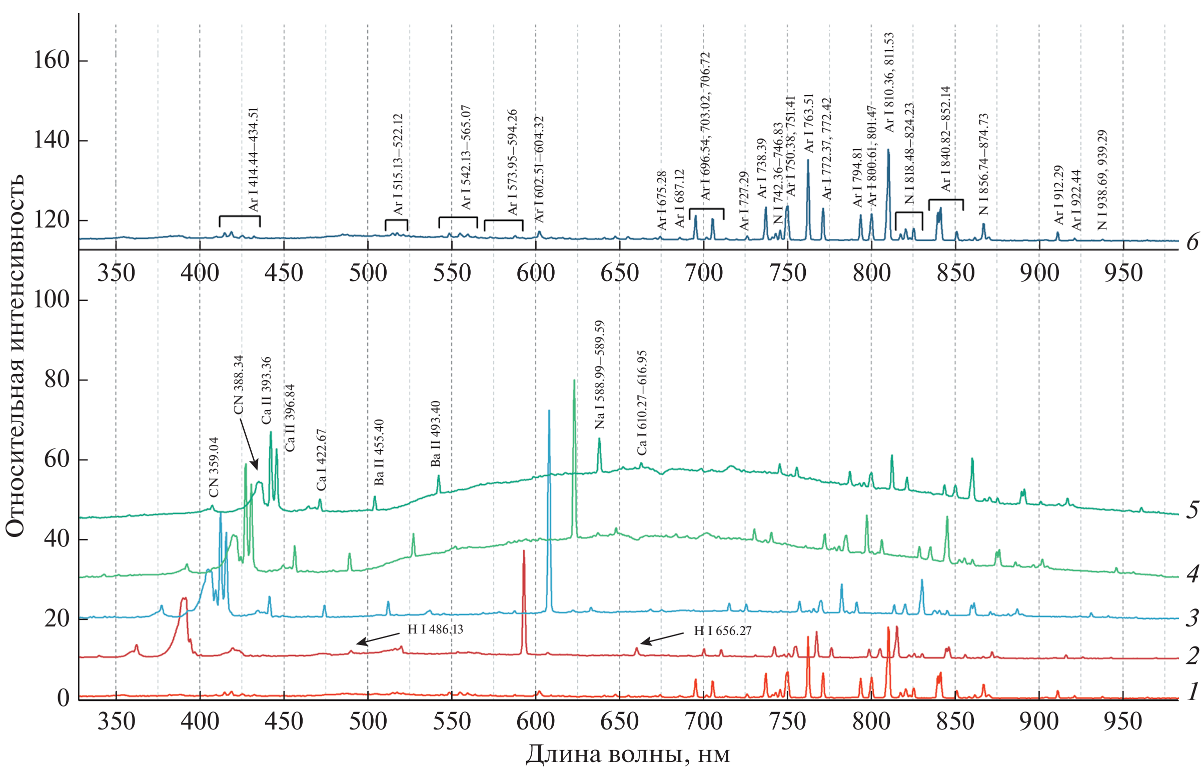


Рис. 6. Последовательность спектров излучения струи в зоне возмущения в процессе ввода, пребывания в струе и вывода стержня: *1* – *t* = 0 мс, *2* – 120, *3* – 220, *4* – 330, *5* – 550, *6* – 620; одноканальный спектрометр AvaSpec 3648, расход – 1 г/с.

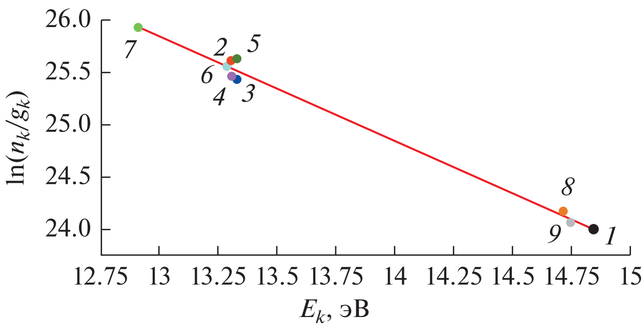


Рис. 7. Определение температуры методом “больцмановской экспоненты” по спектру Ar I: *1* – 703.02 нм, *2* – 738.39, *3* – 696.54, *4* – 706.72, *5* – 727.29, *6* – 794.81, *7* – 912.29, *8* – 687.12, *9* – 675.28; расход – 4 г/с, момент времени – 160 мс, $T_e = 11\,500$ К.

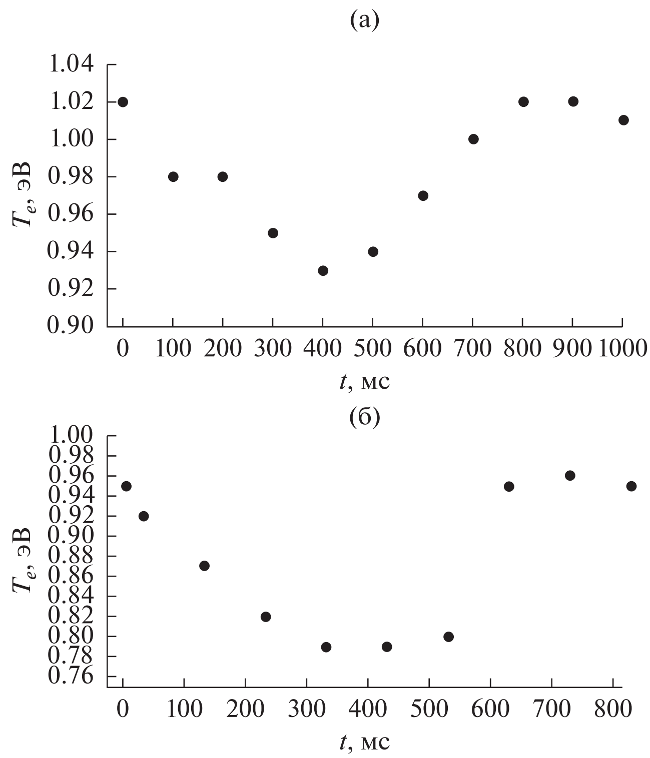


Рис. 8. Результаты измерения температуры плазмы в зоне возмущения в процессе ввода и вывода стержня; расход – 4 (а) и 1 г/с (б).

с существенно различающимися энергиями их возбуждения E_k. Результат анализа населенностей возбужденных состояний Ar I (рис. 7), выполненный для большого набора спектров в различные моменты пребывания зонда в плазме, свидетельствует о выполнимости закона Больцмана для распределения атомов по состояниям возбуждения. Это указывает на то, что температура плазмы в зоне возмущения, полученная методом “больцмановской экспоненты” (при погрешности ее определения не более 10%) в процессе ввода стержня падает на 1000–1500 К, а после вывода стержня из струи восстанавливается ее невозмущенное значение $T \cong 11000$ К (рис. 8).

Установленный уровень захолаживания плазмы при введении зонда подтверждается оценкой изменения энтальпии плазмы в зоне пребывания стержня.

Потеря стержнем массы определена взвешиванием стержня до и после опыта. В результате этих оценок убыль массы стержня вследствие абляции составила $\Delta m_{\text{абл}} \approx 2.5 \times 10^{-3}$ г, а затраченная на абляцию энергия $\Delta W_{\text{абл}} = \Delta m_{\text{абл}} H_{\text{абл}} = 150$ Дж, где $H_{\text{абл}} = 60$ кДж/г – удельная энтальпия сублимации графита [19].

Введенный в струю стержень быстро нагревается до температуры $T_w \approx 2600$ К, измеренной спектроскопически (рис. 9).

Измеренный калориметрически удельный тепловой поток в сечении ввода стержня $q_0 \approx 1.5$ кВт/см^2. Правая часть уравнения баланса энергии на поверхности стержня ($S_{\text{пад}} = \pi dD/2$, $S_R = \pi dD$)

$$q_0 S_{\text{пад}} = \Delta W_{\text{абл}}/\tau_{\text{абл}} + q_R S_R = \Delta m_{\text{абл}} H_{\text{абл}}/\tau_{\text{абл}} + \\ + q_R S_R = 150/0.8 + \varepsilon\sigma T_w^4 \pi dD \cong 220 \text{ Вт}$$

включает в себя затраты на абляцию материала стержня и радиационные потери графита с температурой T_w. Поток мощности, компенсирующий эти потери, составляет

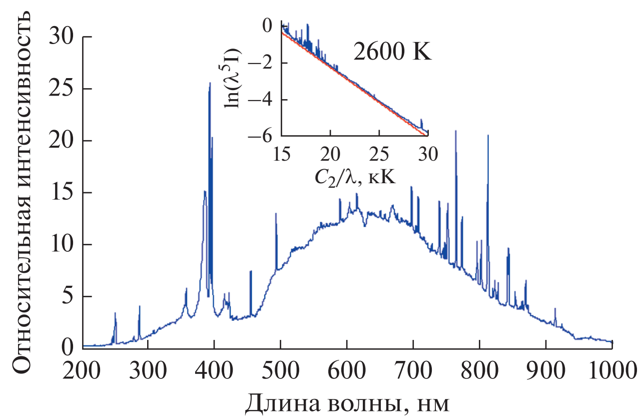


Рис. 9. Определение температуры поверхности стержня по спектру его теплового излучения в координатах Вина [16] (вставка над спектром), $C_2 = hc/k$ – вторая радиационная постоянная.

$$W_{\text{потерь}} = H_0 g S_{\text{стерж}}/S_{\text{струи}} \approx 11 \text{ кДж/г} \times \\ \times 1 \text{ г/см} \times 4d_0/\pi D = 1200 \text{ Вт}.$$

Относительное падение мощности (и энтальпии) струи при расходе 1 г/с равно

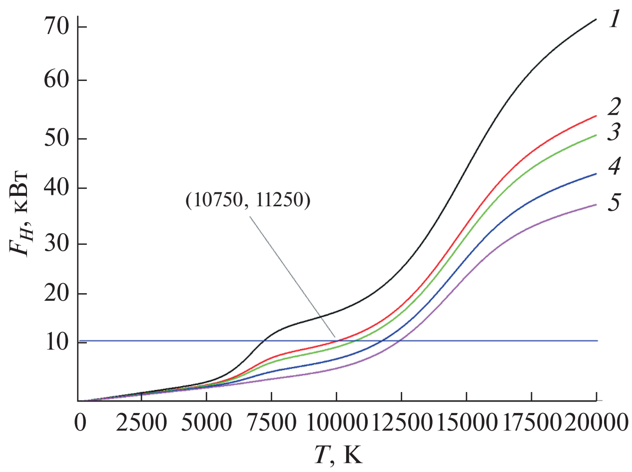


Рис. 10. Полная энтальпия потока при различных долях азота и общем расходе газа 1 г/с как функция температуры плазменной струи: *1* – $0.25N_2 + 0.75Ar$, *2* – $0.125N_2 + 0.875Ar$, *3* – $0.1N_2 + 0.9Ar$, *4* – $0.05N_2 + 0.95Ar$, *5* – $0.01N_2 + 0.99Ar$; горизонтальная линия – мощность, сообщаемая газовой струе.

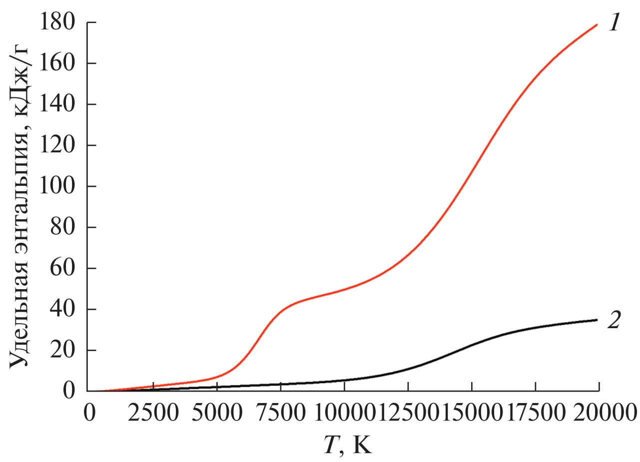


Рис. 11. Сравнение удельной энтальпии азота (*1*) и аргона (*2*) при атмосферном давлении.

$$\Delta H_{пл}/H_0 = \Delta W_{абл}/W_0 = 220/1200 = 0.18.$$

Уменьшение энтальпии аргон-азотной плазмы с температурой $T_0 \approx 11$ кК на 18% в соответствии с расчетом (см. рис. 10) означает уменьшение температуры на $\Delta T_{пл} \approx \Delta H_{пл}/C_p(T_0) \approx 1600$ K, где $C_p(T_0)$ – удельная теплоемкость смеси при температуре набегающего потока T_0. Эта оценка находится в хорошем согласии с измерением охлаждения плазмы (рис. 8б). Время "растворения" температурной неоднородности масштаба $L \approx 0.2$ см за счет кондуктивного теплообмена составит $\tau = L^2/4\chi \cong 4 \times 10^{-5}$ с ($\chi \cong 150$ см^2/с – коэффициент температуропроводности плазмы). Длина релаксации температурной неоднородности при наблюдаемых скоростях 150 и 400 м/с составит соответственно 6 и 16 мм.

ЭНТАЛЬПИЯ СМЕСИ АЗОТА И АРГОНА ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ОТНОСИТЕЛЬНЫХ ДОЛЯХ ПЛАЗМООБРАЗУЮЩИХ ГАЗОВ

Расчет состава и энтальпии плазмы смеси N_2 и Ar проводился на основе уравнений диссоциативного и ионизационного равновесия (типа уравнения Саха) с учетом диссоциации азота и последовательности реакций ионизации, приводящих к отрыву всех валентных электронов с внешней оболочки N и появлению многозарядных ионов. Химические превращения Ar представляются единственной реакцией ионизации. Данные для расчета статистических сумм по электронным уровням атомов и молекулярным уровням, а также значения потенциалов ионизации и диссоциации заимствованы из [20–22].

Продукты термического разложения азота и аргона образуют два ансамбля химически не взаимодействующих частиц, таким образом, энтальпия образующейся смеси является аддитивной величиной. Использованная процедура расчета с учетом поправок на неидеальность плазмы и вириальных поправок, сравнение расчетов теплоемкости и электропроводности азота в широком диапазоне температур (T = 300–120000 K) и давлений (p = 1–100 атм.), а также сравнение с результатами других авторов приведены в [23, 24].

Сумма произведений расхода на удельную энтальпию по исходным компонентам смеси $F_H = H_{Ar}G_{Ar} + H_{N_2}G_{N_2}$ позволяет получить полный поток энтальпии в зависимости от температуры смеси. Использование F_H дает возможность сравнения потока энтальпии, определенного по спектроскопически измеренной температуре на срезе сопла, с мощностью плазмотрона.

На рис. 11 представлено сравнение удельной энтальпии аргона и азота, показывающее вклад возбуждения внутренних степеней свободы, а также реакций диссоциации и первичной ионизации азота в окрестности значений температур $D/10$ и $I_1/10$ соответственно, где D и I_1 – потенциалы диссоциации молекулы азота и ионизации атомов. Учитывая, что КПД ГНП $\eta = 0.75$, мощность, вводимая в плазму, равна $W = \eta P = 11250$ Вт.

На рис. 10 представлены зависимости энтальпии, переносимой газовой струей при общем расходе 1 г/с и различных относительных концентрациях азота. Горизонтальная линия приблизительно показывает уровень полезной тепловой мощности. Отмеченные на графике точки указывают диапазон температуры, реализующийся при вариации относительной концентрации азота. При вариации массовой доли азота в диапазоне 1–10% среднемассовая температура может измениться

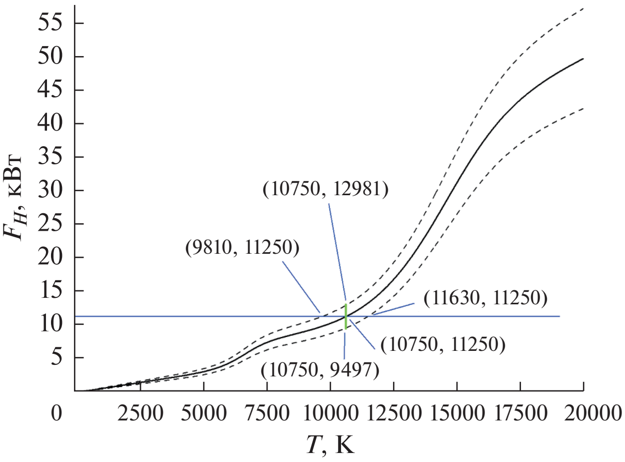


Рис. 12. Диапазон вариации энтальпии: штриховые кривые – с учетом измерений расхода, состав газа $0.1N_2 + 0.9Ar$; вертикальный (зеленый) отрезок – вариация F_H при найденной температуре.

на 3000 K, что превышает погрешность спектроскопического измерения данной величины. При 10%-ной концентрации азота, реализующейся в эксперименте (кривая *2* на рис. 10), температура в струе плазмы составит около 10 750 K.

Аналогичным образом можно оценить мощность, затрачиваемую струей на нагрев и абляцию материала стержня, которая равна $\Delta F_H = (11250 - 9720) S_{\text{стерж}}/S_{\text{струи}} \approx 200$ Вт.

Исходя из формулы расчета потока энтальпии, можно предложить следующую оценку относительной погрешности определения энтальпии смеси на основе относительных погрешностей составляющих:

$$\sigma_{F_H}^2 = \sigma_{G_N}^2 + \sigma_{G_{Ar}}^2.$$

При средней относительной погрешности определения расхода $\sigma_{G_{Ar}} = \sigma_{G_{N_2}} = 0.1$ получим погрешность $\sigma_{F_H} \sim 0.15$, что позволяет представить зависимость потока энтальпии, переносимого струей плазмы, с учетом ошибки вычисления, как показано на рис. 12. На этом рисунке приведен диапазон вариации энтальпии с учетом погрешности измерения расхода, что при условии постоянства и точности значений вводимой тепловой мощности W позволяет оценить погрешности температуры следующим образом. Вариация потока энтальпии имеет вид

$$\delta F_H = H_{N_2}(T)\delta G_{N_2} + H_{Ar}(T)\delta G_{Ar} + \left(\frac{\partial H_{N_2}(T)}{\partial T} G_{N_2} + \frac{\partial H_{Ar}(T)}{\partial T} G_{Ar}\right)\delta T.$$

Соотношения для расходов и погрешностей их измерения

$$\sigma_{N_2} = \sigma_{Ar}, \quad \frac{\delta G_{N_2}}{G_{N_2}} = \frac{\delta G_{Ar}}{G_{Ar}}, \quad G_{N_2} + G_{Ar} = G,$$

где δG_{N_2}, δG_{Ar} – абсолютные погрешности определения потока энтальпии и расходов газов. Пусть соотношение расходов

$$G_{N_2}/G_{Ar} = n.$$

Тогда поток энтальпии равен точно измеренному значению мощности $F_H = W$ и $\delta F_H = 0$, что дает

$$\left(H_{N_2}(T)\frac{G_{N_2}}{G_{Ar}} + H_{Ar}(T)\right)\delta G_{Ar} = -\left(\frac{\partial H_{N_2}(T)}{\partial T} G_{N_2} + \frac{\partial H_{Ar}(T)}{\partial T} G_{Ar}\right)\partial T.$$

Далее

$$\delta T = -\frac{H_{N_2}(T)n + H_{Ar}(T)}{Cp_{N_2}n + Cp_{Ar}}\frac{\delta G_{Ar}}{G_{Ar}},$$

или в самой компактной записи

$$\delta T = -\frac{1}{d\ln\left(H_{N_2}(T)n + H_{Ar}(T)\right)/dT}\frac{\delta G_{Ar}}{G_{Ar}}.$$

Таким образом, вариации расхода и температуры имеют разные знаки.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Как диапазон чисел Re_D, реализуемых в рассматриваемой плазменной струе, так и относительная малость вносимых в нее возмущений способствуют поддержанию ее ламинарного течения. При этом и обтекание стержня является существенно ламинарным. Эти факторы указывают на пригодность предложенного метода создания искусственных оптических неоднородностей для определения скорости плазменных струй.

Возмущающее гидродинамическое воздействие стержня на плазменный поток оказывается незначительным, и на расстояниях, удаленных от зоны возмущения на 5 мм и более вниз по течению, гидродинамические возмущения потока можно считать несущественными.

Визуализация оптических неоднородностей, как появляющихся в результате естественной эволюции плазменной струи, так и искусственно внесенных, позволяет определить скорость движения плазменной струи. Выполненная с высоким пространственным (20 мкм) и временны́м (20 мкс) разрешением синхронизованная двухпозиционная визуализация OH в струях ламинарного (100–200 м/с) и переходного (400–500 м/с) режимов течения показала, что при расходе плазмообразующего газа 1 г/с формируется стабильная плазменная струя протяженностью несколько калибров с ламинарным характером течения, а при расходе 3 г/с режим движения плазменного потока становится пульсационным.

Анализ спектров излучения плазмы в зоне возмущения позволил установить степень захолаживания плазмы в процессе погружения в нее графитового стержня, которое находится в диапазоне 800–1500 K, а также проследить восстановление невозмущенного значения ее температуры $T_0 =$ $= 11000$ K (при погрешности ее определения не более 10%). Выполненный анализ теплового баланса на поверхности стрежня показал, что уменьшение энтальпии набегающего плазменного потока обусловлено главным образом затратами тепла на абляцию материала стержня. При этом спектроскопические измерения температуры в зоне введения стержня находятся в хорошем соответствии с результатами расчетов энтальпии при использованной в работе смеси с концентрацией азота 10%.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов №№ 17-08-00816 и 19-08-00484. Авторы благодарят к.ф.-м.н. И.В. Морозова за предоставление данных о зависимости теплоемкости аргона от температуры.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Reynolds W.C., Parekh D.E., Juvet P.J.D., Lee M.J.D.* Bifurcating and Blooming Jets // Annu. Rev. Fluid Mech. 2003. V. 35. P. 295.
2. *Sandham N.D., Reynolds W.C.* Three-dimensional Simulations of Large Eddies in the Compressible Mixing Layer // J. Fluid Mech. 1991. V. 224. P. 133.
3. *Huerre P., Monkewitz P.* Absolute and Convective Instabilities in Free Shear Layers // J. Fluid Mech. 1985. V. 159. P. 151.
4. *Drazin P., Reid W.* Hydrodynamic Stability. Cambridge: Cambridge University Press., 1981. 525 p.
5. *Занько Ф.С., Михеев А.Н., Хайрнасов К.Р.* Термоанемометрические измерения скорости при изменяющейся температуре потока // Тр. Академэнерго. 2013. № 4. С. 7.
6. *Maas H.G., Gruen A., Papantoniou D.* Particle Tracking Velocimetry in Three-dimensional Flows // Exp. Fluids. 1993. T. 15. № 2. C. 133.
7. *Abbiss J.B., Chubb T.W., Pike E.R.* Laser Doppler Anemometry // Opt. Laser Technol. 1974. T. 6. № 6. C. 249.
8. *Дубнищев Ю.Н., Ринкевичюс Б.С.* Методы лазерной доплеровской анемометрии. М.: Наука; Глав. ред. физ.-мат. лит., 1982.
9. *Дресвин С.В., Клубникин В.С.* Измерение скорости течения плазмы трубкой полного напора // ТВТ. 1969. Т. 7. № 4. С. 633.
10. *Дубнищев Ю.Н., Ринкевичюс Б.С., Фомин Н.А.* Новые методы лазерной анемометрии в исследованиях сложных газодинамических течений // ИФЖ. 2003. Т. 76. № 6. С. 3.
11. *Бэтчелор Д.* Введение в динамику жидкости. Пер. с англ. М.: Мир, 1973.
12. *Damiani D., Tarlet D., Meillot E.* A Particle-Tracking-Velocimetry (PTV) Investigation of Liquid Injection in a DC Plasma Jet // J. Therm. Spray Tech. 2013. V. 23. P. 40.
13. *Shi Z., Hardalupas Y., Taylor A.M.K.P.* Laser-induced Plasma Image Velocimetry // Exp. Fluids. 2019. V. 60. Article № 5.
14. *Исакаев Э.Х., Синкевич О.А., Тюфтяев А.С., Чиннов В.Ф.* Исследование генератора низкотемпературной плазмы с расширяющимся каналом выходного электрода и некоторые его применения // ТВТ. 2010. Т. 48. № 1. С. 105.
15. *Гаджиев М.Х., Исакаев Э.Х., Тюфтяев А.С., Юсупов Д.И.* Мощный генератор низкотемпературной плазмы воздуха с расширяющимся каналом выходного электрода // Письма в ЖТФ. 2016. Т. 42. Вып. 2. С. 44.
16. *Магунов А.Н.* Спектральная пирометрия. М.: Физматлит, 2012. 248 с.
17. *Кавыршин Д.И., Саргсян М.А., Горячев С.В., Хромов М.А., Чиннов В.Ф., Мордынский А.В.* Измерение скорости плазменной струи по движению внесенных в нее оптических неоднородностей // Вестн. МЭИ. 2019. № 1. С. 124.
18. *Ван-Дайк М.* Альбом течений жидкости и газа. М.: Мир, 1985. 180 с.
19. *Дэшман С.* Научные основы вакуумной техники. М.: Мир, 1964.
20. *Striganov A.R., Sventitskii N.S.* Tables of Spectral Lines of Neutral and Ionized Atoms. N.Y.: Springer, 1968.
21. Atomic Energy Levels. V. 1. US Department of Commerce. Washington, 1949.
22. *Radzig A.A., Smirnov B.M.* Reference Data on Atoms, Molecules, and Ions. Berlin–Heidelberg: Springer, 1985.
23. *Gadzhiev M.K., Kulikov Y.M., Panov V.A. et al.* Supersonic Plasmatron Nozzle Profiling with the Real Properties of High Temperature Working Gas // High Temp. 2016. V. 54. P. 38.
24. *Yusupov D.I., Kulikov Y.M., Gadzhiev M.K., Tyuftyaev A.S., Son E.E.* High-pressure Ignition Plasma Torch for Aerospace Testing Facilities // J. Phys.: Conf. Series. 2016. V. 774. P. 012185.

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР, 2021, том 59, № 1, с. 51–54

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВ

УДК 536.21

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО *n*-$CdSnAs_2$ В ОБЛАСТИ ТЕМПЕРАТУР 300–800 К

Ш. М. Исмаилов[1], С. М. Оракова[1, 2, *], З. А. Исаев[2], Х. Ш. Яхьяева[2]

[1]ФГБУН "Институт физики им. Х.И. Амирханова" ДФИЦ РАН, г. Махачкала, Россия

[2]ФГБОУ ВО "Дагестанский государственный аграрный университет им. М.М. Джамбулатова", г. Махачкала, Россия

*E-mail: orakova.s@mail.ru

Поступила в редакцию 23.12.2019 г.
После доработки 03.07.2020 г.
Принята к публикации 14.10.2020 г.

В работе представлены результаты исследования температурных зависимостей удельной теплоемкости c_p, температуропроводности α и теплопроводности λ поликристаллического $CdSnAs_2$ проводимости *n*-типа. Проведен анализ возможных механизмов теплопроводности в исследованном диапазоне температур. Показано, что основными механизмами теплопереноса для поликристаллического *n*-$CdSnAs_2$ являются электронный, биполярный и фононный. Обнаружено, что фононная составляющая теплопроводности, подсчитанная как разность между общей теплопроводностью и электронной и биполярной составляющими теплопроводности, уменьшается с температурой быстрее, чем по закону $\lambda_p \sim T^{-1}$.

DOI: 10.31857/S0040364421010051

ВВЕДЕНИЕ

Полупроводниковые соединения $A^2B^4C_2^5$, кристаллизирующиеся со структурой халькоперита, относятся к перспективным материалам оптоэлектроники, нелинейной оптики и других областей твердотельной электроники [1, 2]. Широкое применение этих материалов связано со сложной проблемой воспроизводимого синтеза моно- и поликристаллов с заданными свойствами. Поэтому представляется актуальным исследование комплекса теплофизических свойств (ТФС) этих материалов. Такие исследования интересны и с позиции фундаментального материаловедения. Теплофизические свойства являются структурно чувствительными, поскольку демонстрируют аномалии в температурной области изменения структуры. Выяснение природы дефектов структуры и способов контроля их должны привести к максимальной реализации ценных свойств этих соединений.

В настоящей работе с учетом вышесказанного изучена температурная зависимость удельной теплоемкости, температуропроводности и теплопроводности в широком интервале температур – от 300 до 800 К. Других работ, посвященных комплексному исследованию ТФС, в литературе не найдено.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Образцы для исследования получены методом непосредственного сплавления стехиометрических элементов особой чистоты (класса не ниже В3) в эвакуированных кварцевых ампулах с вибрационным перемешиванием расплава при максимальных температурах и дальнейшим медленным охлаждением до комнатной температуры.

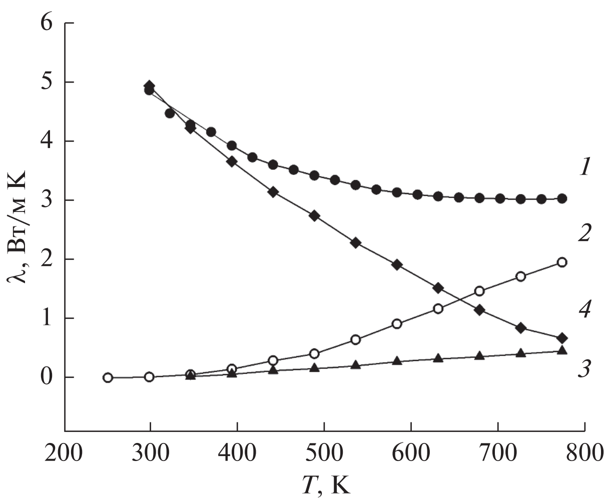
Качество образцов контролировалось рентгеновским, металлографическим анализами и измерениями некоторых электрофизических параметров в области комнатных температур. По данным анализа, полученные образцы *n*-$CdSnAs_2$ представляют собой поликристаллы *n*-типа с концентрацией электронов в примесной области $n \approx 8 \times 10^{16}$ см$^{-3}$. Плотность определялась пикнометрически и равна $\rho = 5.44 \times 10^3$ кг м$^{-3}$. Измерения проводились на двух отдельных образцах, вырезанных из одного и того же слитка.

Исследование температуропроводности осуществлялось методом лазерной вспышки на установке LFA-457 Micro Flash (NETZSCH, Германия). Погрешность измерений составляла ±5%. Измерение теплоемкости проводилось на дифференциальном сканирующем калориметре DSC 204 FI Phoenix (NETZSCH). Скорость изменения температуры – 10 K/мин. Погрешность измерения не превышала ±3%. Электропровод-

Теплофизические свойства поликристаллического n-$CdSnAs_2$ в интервале температур 300–800 K при $\rho = 5.44 \times 10^3$, кг м$^{-3}$

T, K	c_p, Дж/(кг K)	$\alpha \times 10^6$, м^2/с	λ, Вт/(м K)
300	258	3.70	5.20
325	258	3.38	4.71
350	259	3.20	4.51
375	260	3.10	4.38
400	261	2.92	4.14
425	263	2.75	3.93
450	267	2.60	3.80
475	270	2.53	3.71
500	271	2.45	3.61
525	271	2.40	3.53
550	272	2.33	3.44
575	272	2.27	3.36
600	273	2.23	3.31
625	274	2.20	3.27
650	275	2.17	3.24
675	278	2.13	3.22
700	281	2.10	3.21
725	282	2.09	3.20
750	284	2.07	3.19
775	285	2.06	3.19
800	287	2.05	3.20

ность измерялась четырехзондовым компенсационным методом [3]. Ошибка измерений не превышала ±4%.



Температурная зависимость общей теплопроводности и ее составляющих в интервале температур 300–800 K: *1* – λ, *2* – $\lambda_{эл}$, *3* – $\lambda_{бп}$, *4* – $\lambda_р$.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Полученные результаты исследования температурных зависимостей удельной теплоемкости c_p, температуропроводности α и теплопроводности λ в интервале температур 300–800 K представлены в таблице. На рисунке приведены данные по температурной зависимости теплопроводности и ее составляющих в исследованном интервале температур.

Теплофизические свойства $CdSnAs_2$ в области высоких температур до настоящего времени исследованы недостаточно. Теплопроводность поликристаллов $CdSnAs_2$, по данным различных авторов, в области комнатных температур равна 4.00–9.21 Вт/(м K) [1, 3, 4]. Результаты не согласуются как между собой, так и с полученными в настоящей работе данными. Наблюдаемое расхождение данных по теплопроводности различных авторов, по-видимому, обусловлено как различием в микроструктуре образцов, вызванным применением разных методов синтеза, так и степенью надежности использованных экспериментальных методик. Для сравнения с экспериментом теплопроводность $CdSnAs_2$ при 300 K рассчитывалась по формуле Кейса: $\lambda T = B_{тв}\dfrac{T_{пл}^{3/2}\rho^{2/3}}{A^{7/6}}$, где $B_{тв}$ – эмпирическая постоянная (различна для кристаллов с разными типами химической связи), ρ – плотность, $A_{ср}$ – средний атомный вес. Экспериментальные данные по λ хорошо согласуются с рассчитанными по формуле значениями при $B_{тв} = 0.04$. Значение $B_{тв} = 0.04$ отличается от рекомендуемого Кейсом для кристаллов с “чисто” ковалентной связью значения $B_{тв} = 0.13$, что, видимо, связано с ионно-ковалентным характером химической связи в соединении $CdSnAs_2$.

Как видно из рисунка, общая теплопроводность $CdSnAs_2$ меняется с температурой по гиперболическому закону. Решеточная компонента теплопроводности в исследованном интервале температур вычислялась путем вычитания электронной $\lambda_{эл}$ и биполярной $\lambda_{бп}$ составляющих из общей теплопроводности.

Авторские экспериментальные данные по электропроводности σ в интервале температур 200–450 K согласуются с данными работы [5], результаты которой использовались для расчета электронной и биполярной составляющих теплопереноса во всем исследованном интервале температур.

По данным об электропроводности и постоянной Холла, в интервале температур 200–300 K n-$CdSnAs_2$ является примесным полупроводником. Выше 300 K наступает область смешанной проводимости с шириной запрещенной зоны $\Delta E = 0.26$ эВ.

Электронная составляющая теплопроводности рассчитывалась по формуле Видемана–Франца $\lambda_э = L\sigma T$ как для случая невырожденного электронного газа в предположении, что рассеяние электронов происходит на акустических колебаниях решетки. В исследуемом образце для случая невырожденного электронного газа рассеяние электронов на акустических колебаниях решетки является упругим. Поэтому постоянная L в формуле Видемана–Франца равна числу Лоренца $L_0 = 2.45 \times 10^{-8}$ Вт Ом/К^2.

В области смешанной проводимости для вычисления биполярной компоненты теплопереноса использовалась формула Давидова–Шмушкевича, преобразованная к виду

$$\lambda_{бп} = \frac{b}{(b+1)^2} L\sigma T \left[\frac{\Delta E}{2KT} + 2\right]^2,$$

где b – отношение подвижностей электронов и дырок. Исходя из анализа результатов работ [1, 6–9], отношение подвижностей для расчета $\lambda_{бп}$ принималось равным $b = 58$. Полученные результаты расчетов $\lambda_{эл}$ и $\lambda_{бп}$ приведены на рисунке (кривые *2* и *3* соответственно). Там же представлены значения для решеточной составляющей теплопроводности $\lambda_р$ (кривая *4*), подсчитанной как разность $\lambda_р = \lambda - (\lambda_{эл} + \lambda_{бп})$. Следует отметить, что поскольку отношение подвижностей электронов и дырок велико, то электрические и тепловые свойства кристаллов $CdSnAs_2$ во всем интервале температур определяются в основном только электронами.

Как видно из рисунка, температурная зависимость решеточной составляющей теплопроводности $\lambda_р$ качественно соответствует теории. Однако, согласно расчетам в области температур выше дебаевской (234 K из [10]), произведение $\lambda_р T$ не остается постоянным, а падает, т.е. $\lambda_р$ зависит от температуры сильнее, чем T^{-1}.

Решеточная теплопроводность, согласно настоящим расчетам, в исследованном интервале температур падает по закону $\lambda_р \sim T^{-1.53}$. Отклонение показателя n в зависимости $\lambda_р \sim T^{-n}$ от единицы характерно и для других соединений со структурой халькоперита. Авторы [6] связывают отклонение показателя n от единицы с возможной зависимостью постоянной Грюнайзена γ от температуры. Параметр Грюнайзена определялся путем сопоставления экспериментальной величины λ с рассчитанными по формуле Лейбфрида–Шлемана. Расчеты показали, что для удовлетворительного согласия теории с экспериментом параметр Грюнайзена для $CdSnAs_2$ необходимо принять равным $\gamma = 0.58$. Эта величина согласуется со средними величинами $\gamma \approx 0.63$–0.67, определенными разными способами для полупроводников группы $A^{III}B^V$, а также Ge и Si, сходных по структуре и типу химической связи с $CdSnAs_2$. Поскольку точный расчет времени релаксации ангармонического рассеяния не выполнен, то представляется целесообразным сравнить теплопроводность группы веществ с алмазоподобной структурой и попытаться выявить причину расхождения теории с экспериментом.

Авторы [8, 11] на основании анализа ряда теоретических работ, посвященных объяснению отклонения фононной теплопроводности от закона T^{-n} (где $n > 1$), пришли к выводу, что такое убывание хорошо объясняется ролью оптических фононов в рассеянии акустических, так как частоты продольных акустических фононов, которым отводится решающая роль в рассеянии поперечных [12, 13], близки к частотам оптических фононов. При малых групповых скоростях мал вклад фононов в теплоперенос, но велик вклад в рассеяние. При больших скоростях их роль в рассеянии не так велика, но зато вклад в перенос тепла становится существенным. Таким образом, учет оптических фононов в фонон-фононном рассеянии позволяет качественно объяснить температурный ход $\lambda_р(T)$ для соединений со структурой халькоперита. Проведение количественного анализа влияния оптико-акустического рассеяния на теплопроводность не представляется возможным из-за отсутствия подробных сведений о фононном спектре, в частности о характере дисперсии оптических ветвей.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Впервые проведены комплексные исследования теплофизических свойств поликристаллического n-$CdSnAs_2$ в интервале температур 300–800 K. Проведен анализ возможных механизмов переноса тепла в $CdSnAs_2$. Показано, что решеточная составляющая теплопроводности при $T > 300$ K убывает с ростом температуры по закону $\lambda_р \sim T^{-n}$, где $n > 1$, что характерно и для других соединений со структурой халькоперита.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Боршевский А.С., Вайполгин А.А., Валов Ю.А. и др.* Полупроводники $A^2B^4C^5_2$. М.: Советское радио, 1974. 367 с.
2. *Прочухан В.Д., Рудь Ю.В.* Перспективы практического применения полупроводников // ФТП. 1978. Т. 12. № 2. С. 209.
3. *Магомедов Я.Б., Гаджиев Г.Г.* Теплопроводность и электропроводность соединения $CdSnAs_2$ в твердом и жидком состояниях // Изв. РАН. Сер. физическая. 2010. Т. 74. № 5. С. 727.
4. *Бергер Л.Н., Тарасов В.В., Щукина И.К.* Труды ИРЕА. 1967. Т. 30. С. 412.
5. *Matyas M., Hosch P.* The Semiconducting Properties of $CdSnAs_2$ // Czech. I. Phys. 1962. V. B12. № 10. P. 778.

6. *Полянская Т.А.* О подвижности электронов в $CdSnAs_2$ // ФТП. 1970. Т. 4. № 7. С. 1239.
7. *Steigmaeir E.F., Kudman I.* Acoustical-Optical Phonon Scattering in Ge, Si and III–V Compounds // Phys. Rev. 1966. V. 141. Iss. 2. P. 767.
8. *Логачев Ю.А., Васильев Л.Н.* Температурная зависимость фононной теплопроводности Ge, Si и $A^{III}B^{V}$ при высоких температурах // ФТТ. 1973. Т. 15. № 5. С. 1612.
9. *Голованов В.В., Горюнова Н.А., Коршак Н.М.* Некоторые свойства n-$CdSnAs_2$ // ФТТ. 1965. Т. 7. № 2. С. 3655.
10. *Голованов В.В., Горюнова Н.А., Коршак Н.М. и др.* Электрические свойства n-$CdSnAs_2$ в широком интервале температур и концентраций примесей // Укр. физ. журн. 1968. Т. 13. № 1. С. 100.
11. *Логачев Ю.А., Юрьев М.С.* Фонон-фононное рассеяние и решеточная теплопроводность при высоких температурах // ФТТ. 1972. Т. 14. С. 3336.
12. *Holland M.G.* Analysis of Lattice Thermal Conductivity // Phys. Rev. 1963. V. 132. P. 2461.
13. *Holland M.G.* Analysis of Thermal Conductivity-A Reply // Phys. Rev. B. 1971. V. 3. P. 3575.

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР, 2021, том 59, № 1, с. 55–61

УДК 621. 039.534.54:621.364:634.3

ВЛИЯНИЕ МЕДИ НА ТЕПЛОЕМКОСТЬ И ИЗМЕНЕНИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ СВИНЦА

© 2021 г. С. У. Худойбердизода[1], И. Н. Ганиев[2, *], С. Э. Отаджонов[3], Б. Б. Эшов[1], У. Ш. Якубов[2]

[1]*Государственное научное учреждение “Центр исследования инновационных технологий при АН РТ”, г. Душанбе, Республика Таджикистан*

[2]*Институт химии им. В.И. Никитина АН РТ, г. Душанбе, Республика Таджикистан*

[3]*Худжандский государственный университет им. Б. Гафурова, г. Худжанд, Республика Таджикистан*

***E-mail: ganiev48@mail.ru*

Поступила в редакцию 22.01.2020 г.
После доработки 20.05.2020 г.
Принята к публикации 18.06.2020 г.

В настоящей работе теплоемкость сплавов свинца с медью определялась в режиме охлаждения по известной теплоемкости эталонного образца из меди марки М00. Получены полиномы, описывающие температурную зависимость теплоемкости и изменения термодинамических функций сплавов. Установлено, что в целом с ростом температуры и с увеличением содержания меди теплоемкость, энтальпия и энтропия сплавов свинца увеличиваются, а значения энергии Гиббса уменьшаются.

DOI: 10.31857/S0040364421010099

ВВЕДЕНИЕ

В гидроэлектрометаллургии, гальванотехнике, аккумуляторном производстве и кабельной технике свинец и его сплавы широко используются в качестве материала анода и защитной оболочки. Несмотря на разработку новых анодных материалов и защитных покрытий, свинец, несомненно, останется основным материалом для крупномасштабных электрохимических производств и кабельной техники.

Свинцовый анод, как легированный, так и нелегированный, представляет собой неоднородную систему, в которой два основных процесса – выделение кислорода и окисление свинца – протекают на пространственно-разграниченных участках. В связи с этим для увеличения стойкости анода необходимо в максимальной степени облегчить первый процесс и затормозить второй. Повышения стойкости свинцового анода для различных электрохимических производств требует проведения исследований по установлению механизма и термодинамики электродных процессов, формированию защитного фазового слоя, а также по разработке принципов легирования [1].

В литературе имеются противоречивые сведения о влиянии добавок меди на коррозионную стойкость свинца в среде серной кислоты. Чтобы предотвратить рост зерна, рекомендуются присадки к свинцу меди (0.04%), иногда совместно с сурьмой (0.1%) и оловом (0.02%). Сообщается, что уже следы меди в свинце уменьшают его коррозию [2], однако в серной кислоте, содержащей продукты нитролиза или соляную кислоту, коррозия с медью усиливается [1].

Авторами [2, 3] показано, что малые добавки меди (0.1–0.3%) к свинцу повышают его коррозионную стойкость. Дальнейшее увеличение содержания меди (до 6 мас. %) не вызывает существенных изменений в коррозионном поведении сплавов. Минимум скорости коррозии сплавов приходится на концентрации до 0.33% меди. Это объясняется тем, что эвтектическая структура сплавов с малым избытком фазы меди является наиболее эффективной с точки зрения анодной стойкости сплавов.

Из обзора вытекает, что коррозионно-электрохимические свойства сплавов системы Pb–Cu хорошо изучены на предмет использования в качестве анодных материалов для электрохимических производств и работы в среде серной кислоты. Однако в литературе нет сведений о теплофизических и термодинамических свойствах указанных сплавов. Имеются сведения только о теплоемкости сплавов свинца с щелочноземельными металлами [4, 5].

Настоящая работа посвящена исследованию влияния добавок меди на температурную зависимость теплоемкости и изменения термодинамических функций свинца. Исследования проведены в режиме охлаждения.

ТЕОРИЯ МЕТОДА И СХЕМА УСТАНОВКИ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕПЛОЕМКОСТИ СПЛАВОВ

Существует много методов измерения теплоемкости твердого тела. В данной работе используется метод сравнения кривых охлаждения эталонного и исследуемого образцов. Измерения выполняются на охлаждаемом образце, нагретом до температуры, превышающей температуру окружающей среды. Скорость охлаждения зависит от теплоемкости материала образца. Сравнивая кривые охлаждения – термограммы (зависимости температуры от времени) двух образцов, один из которых служит эталоном с известной теплоемкостью, можно определить теплоемкость другого.

Физические основы предлагаемого метода измерения состоят в следующем. Охлаждение образцов обусловлено тремя механизмами теплопередачи: теплопроводностью окружающей среды, конвекцией и излучением. Для первых двух процессов считается, что плотность теплового потока от нагретого тела J пропорциональна разности между температурой поверхности образца T и температурой окружающей среды T_0 (закон Ньютона–Рихмана):

$$J = \alpha(T - T_0). \qquad (1)$$

Коэффициент теплопередачи α зависит от большого количества параметров, и для него невозможно дать общую формулу. В связи с этим на практике коэффициент теплоотдачи определяется экспериментально. Тепловой поток за счет излучения имеет качественно иную зависимость от температуры (закон Стефана–Больцмана):

$$J = \sigma\varepsilon S(T^4 - T_0^4),$$

где $\sigma = 5.67 \times 10^{-8}$ Вт/(м$^{-2}$ К$^{-4}$); ε – коэффициент поглощения; S – площадь поверхности тела. Лишь при небольшой разности температур $T - T_0$ он приближенно сводится к виду (1)

$$J = 4\sigma\varepsilon S T_0^3(T - T_0). \qquad (2)$$

Если учитывать излучение с поверхности тела в виде соотношения (2), то температура при охлаждении тела будет спадать по экспоненте. Действительно, уравнение теплового баланса

$$\delta Q = -Jdt$$

здесь имеет вид

$$C_P^0 m \frac{dT}{dt} = -\alpha(T - T_0)ds,$$

где C_P^0, m – удельная теплоемкость и масса тела. Его решением является

$$T(t) = (T_1 - T_0)e^{-t/\tau} + T_0,$$

где T_1 – начальная температура, t – время охлаждения образцов, $\tau = mC_P/(\alpha S)$ – время тепловой релаксации, в с.

Таким образом, если выполняются все указанные условия, то теплоемкость материала образца можно определить из измеренных по термограммам скоростей охлаждения эталона и исследуемого образца. Однако, поскольку величина α неизвестна, измерения нужно вести параллельно с эталонным образцом с известной теплоемкостью и при тех же размерах, чтобы условия охлаждения были идентичны. Если коэффициент α у них одинаков, то теплоемкость измеряемого материала C_x можно найти по формуле

$$C_x^0 = C_э^0 \frac{m_э \left(\frac{dT}{dt}\right)_э}{m_x \left(\frac{dT}{dt}\right)_x}, \qquad (3)$$

где $C_э^0$ – теплоемкость эталонного материала; m_x, $m_э$ – массы исследуемого и эталонного образцов; измеренные скорости охлаждения для исследуемого образца и эталона, которые равны $\theta_x = \left(\frac{dT}{dt}\right)_x$ и $\theta_э = \left(\frac{dT}{dt}\right)_э$.

Этот метод предполагает следующее:

1) постоянство C_x, $C_э$ и α при изменении температуры;

2) охлаждение в бесконечной среде;

3) температуры образцов, при которых излучением можно пренебречь по сравнению с теплопроводностью и конвекцией.

Несоблюдение любого из данных условий нарушает экспоненциальный ход кривой охлаждения.

Разумеется, учет зависимости C_x и $C_э$ от температуры можно выполнить, разбив термограмму на узкие интервалы температур (в которых теплоемкости и коэффициент α можно считать постоянными) и найдя для каждого интервала свои скорости охлаждения образцов при данной температуре – $\theta_x(T)$ и $\theta_э(T)$, которые и используются для расчета C_X^0. Коэффициенты теплопередачи α для всех образцов предполагаются одинаковыми.

Схема установки для измерения теплоемкости сплавов представлена на рис. 1. Электропечь *3* смонтирована на стойке *6*, по которой она может перемещаться вверх и вниз. Образец *4* и эталон *5* (тоже могут перемещаться) представляют собой цилиндры длиной 30 мм и диаметром 16 мм с высверленными каналами с одного конца, в которые вставлены термопары. Концы термопар подведены к цифровым многоканальным термометрам *7* и *8*, которые подсоединены к компьютеру *10*.

Электропечь включается через автотрансформатор *1*, нужная температура выставляется с помощью терморегулятора *2*. По показаниям цифрового многоканального термометра отмечается значение начальной температуры. Измеряемый образец и эталон вдвигаются в электропечь *3* и нагреваются до нужной температуры, которая контролируется по показаниям цифрового многоканального термометра на компьютере *8*. Далее измеряемый образец и эталон одновременно выдвигаются из электропечи. С этого момента фиксируется снижение температуры и показания цифрового термометра записываются на компьютер через каждые 10 с. Образец и эталон охлаждаются ниже 30°C.

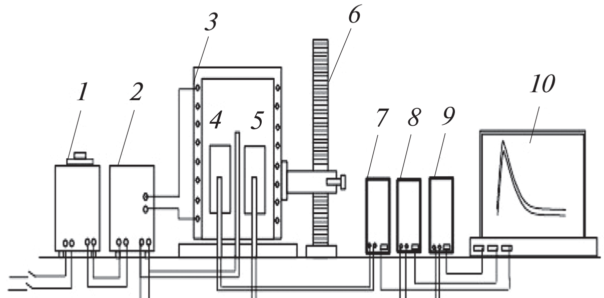


Рис. 1. Установка для определения теплоемкости твердых тел в режиме “охлаждения”: *1* – автотрансформатор, *2* – терморегулятор, *3* – электропечь, *4* – образец измеряемый, *5* – эталон, *6* – стойка электропечи, *7* – цифровой термометр образца, *8* – цифровой термометр эталона, *9* – цифровой термометр общего назначения, *10* – регистрирующий прибор.

Для измерения температуры использовался многоканальный цифровой термометр, который позволяет прямо фиксировать результаты измерений на компьютере в виде таблиц. Точность измерения температуры равнялась 0.1°C. Относительная ошибка измерения температуры в интервале от 40 до 400°C составила ±1%. Погрешность измерения теплоемкости по предлагаемой методике не превышает 4–6% в зависимости от температуры [6, 7].

Обработка результатов измерений производилась в программе MS Excel. Графики строились с помощью программы Sigma Plot. Коэффициент корреляции составил величину $R_{корр} \geq 0.998$, подтверждая правильность выбора аппроксимирующей функции. Подробная методика исследования теплоемкости сплавов представлена в работах [8–11].

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для исследования теплоемкости брались сплавы свинца с медью, полученные в шахтной печи сопротивления типа СШОЛ в тиглях из оксида алюминия. При получении сплавов учитывался характер взаимодействия компонентов в системе Pb–Cu, который характеризуется широкой областью несмешиваемости (от 37.8 до 85.2 мас. % Pb) и ограниченной взаимной растворимостью. Эвтектика в системе Pb–Cu образуется при 99.93 мас. % свинца. Растворимость меди в свинце при эвтектической температуре (326°C) – менее 0.01 мас. %. С учетом этого содержание меди в свинце составляло 0.01–0.5 мас. %, что соответствовало до- и заэвтектической области на диаграмме состояния Pb–Cu.

Сплавы производились из свинца марки СО (ГОСТ 3778-98) и меди марки М00 с содержанием меди 99.96% (ГОСТ 859–2001). Из полученных сплавов отливались цилиндрические образцы диаметром 16 мм и длиной 30 мм, которые в дальнейшем использовались для определения теплоемкости.

Экспериментально полученные кривые охлаждения образцов из сплавов свинца с медью представлены на рис. 2а и описываются уравнением вида

$$T = a\mathrm{e}^{-bt} + p\mathrm{e}^{-kt}, \quad (4)$$

где a, b, p, k – постоянные для данного образца.

Указанное уравнение получено математической обработкой кривых охлаждения образцов

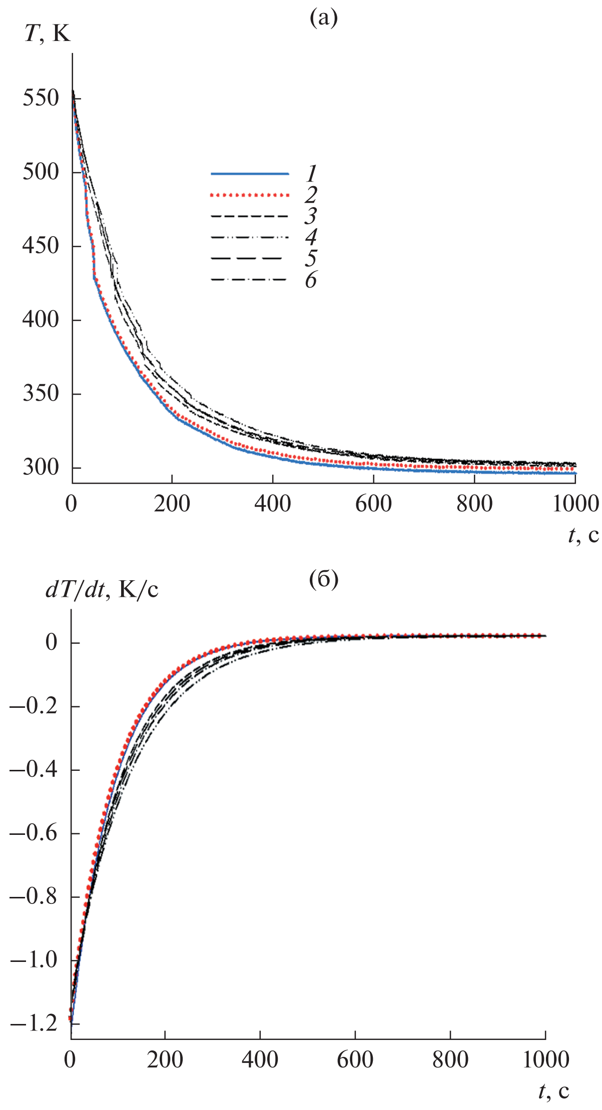


Рис. 2. График зависимости температуры от времени охлаждения (а) и скорости охлаждения от времени (б) для образцов эталона (*1*) и сплавов свинца с медью: *2* – Pb, *3* – Pb + 0.01% Cu, *4* – Pb + 0.05% Cu, *5* – Pb + + 0.1% Cu, *6* – Pb + 0.5% Cu.

Таблица 1. Значения коэффициентов в уравнении (5) для сплавов системы Pb–Cu и эталона (Cu марки М00)

Содержание меди в свинце, мас. %	m, г	a, K	$b \times 10^3$, с$^{-1}$	p, K	$k \times 10^5$, с$^{-1}$
0.0	67.29	224.29	10.7	314.93	3.28
0.01	67.18	237.82	9.16	316.72	2.78
0.05	67.14	238.48	7.82	317.23	2.93
0.1	65.77	242.44	8.82	317.93	2.97
0.5	65.01	244.06	8.55	315.68	2.86
Эталон	49.17	96.90	4.57	327.12	4.61

Таблица 2. Зависимость скорости охлаждения образцов из сплавов системы Pb–Cu и эталона от времени

Время, с	Эталон	Содержание меди в свинце, мас. %				
		0.0	0.01	0.05	0.1	0.5
0	–0.575	–1.205	–1.194	–1.161	–1.186	–1.199
200	–0.521	–1.090	–1.075	–1.047	–1.069	–1.081
400	–0.465	–0.993	–0.978	–0.953	–0.973	–0.984
600	–0.371	–0.814	–0.801	–0.782	–0.798	–0.807
800	–0.133	–0.297	–0.293	–0.287	–0.293	–0.296
1000	–0.015	–0.033	–0.032	–0.032	–0.032	–0.033

сплавов. Количество экспонент в уравнении (4) выбрано исходя из коэффициента корреляции, который при двойной экспоненциальной зависимости $R > 99.96\%$.

После дифференцирования (4) по t получается уравнение для определения скорости охлаждения сплавов

$$\frac{dT}{dt} = -ab\mathrm{e}^{-bt} - pk\mathrm{e}^{-kt}. \qquad (5)$$

Значения коэффициентов a, b, p, k в уравнении (5) для исследованных сплавов приведены в табл. 1. Рассчитанные зависимости скорости охлаждения от времени для образцов сплавов Pb–Cu представлены на рис. 2б и в табл. 2.

Далее по рассчитанным значениям скорости охлаждения образцов сплавов по уравнению (3) вычисляется удельная теплоемкость сплавов свинца с медью. Получено следующее общее уравнение температурной зависимости удельной теплоемкости сплавов свинца с медью и эталона (Cu марки М00):

$$C_{P_0}^0 = a + bT + cT^2 + dT^3. \qquad (6)$$

Значения коэффициентов в уравнении (6) представлены в табл. 3.

Можно увеличить количество коэффициентов в (6), однако это усложнит оформление конечных результатов (с ростом коэффициентов значительно увеличивается количество знаков после запятой).

Результаты расчета $C_{P_0}^0$ по формулам (3) и (6) с шагом 50 K представлены в табл. 4 и на рис. 3. Сравнение полученных данных о температурной зависимости теплоемкости для чистого свинца с данными работы [5] и справочника [12] показывает хорошее совпадение. Сравнение результатов расчета по правилу Неймана–Коппа теплоемкости сплава свинца с 0.5 мас. % меди (при 300 K) с экспериментальными результатами дает отличие в 6%, что является вполне приемлемым.

Если исходить из диаграммы состояния Pb–Cu первые из двух синтезированных в настоящей работе сплавов с содержанием меди 0.01 и 0.05 мас. % попадают в доэвтектическую область, два других сплава, содержащие 0.1 и 0.5 мас. % меди, – в заэвтектическую область.

Анализ зависимости изменений теплоемкости сплавов системы Pb–Cu от концентрации легирующей добавки в пределе изученных концентраций меди (0.01–0.5 мас. %) показал незначительный рост теплоемкости у заэвтектических сплавов по сравнению с доэвтектическими.

Таблица 3. Значения коэффициентов уравнения (6) для сплавов системы Pb–Cu и эталона

Содержание меди в свинце, мас. %	a, Дж/(кг К)	b, Дж/(кг К^2)	$c \times 10^3$, Дж/(кг К^3)	$d \times 10^6$, Дж/(кг К^4)
0.0	336.37	–1.63	4.06	–3.15
0.01	335.97	–1.64	4.15	–3.27
0.05	335.02	–1.63	4.16	–3.29
0.1	334.17	–1.62	4.18	–3.33
0.5	331.06	–1.60	4.22	–3.41
Эталон	324.45	0.27	–0.29	0.14

Таблица 4. Температурная зависимость удельной теплоемкости (Дж/(кг К)) сплавов системы Pb–Cu и эталона

Содержание меди в свинце, мас. %	T, K						Рост $C^0_{P_0}$, %
	300	350	400	450	500	550	
0.0	127.69	128.13	132.32	137.92	142.55	143.85	12.65
0.01	129.20	130.16	134.71	140.38	144.74	145.32	12.48
0.05	131.59	133.06	138.06	144.11	148.77	149.54	13.65
0.1	134.01	135.83	141.05	147.16	151.67	152.08	13.48
0.5	138.80	141.81	148.03	154.88	159.82	160.28	15.48
Рост $C^0_{P_0}$, %	8.69	10.68	11.87	12.30	12.12	11.42	–
Эталон	384.99	391.67	397.66	403.07	408.00	412.57	7.16

Для расчета температурной зависимости изменения энтальпии, энтропии и энергии Гиббса использованы интегралы от удельной теплоемкости (6):

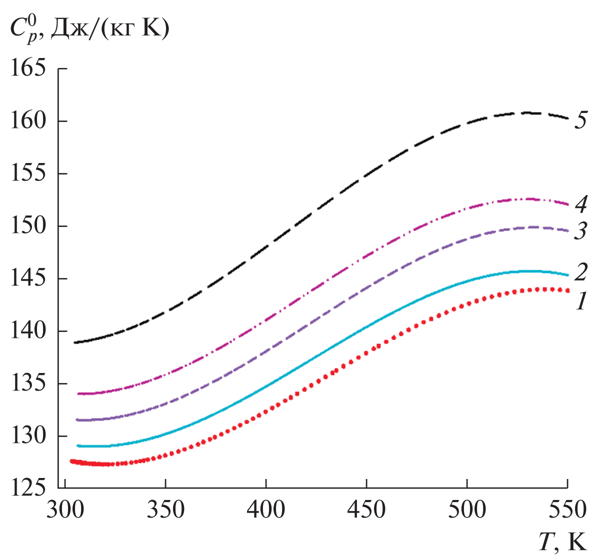


Рис. 3. Температурная зависимость удельной теплоемкости сплавов свинца с медью и эталона: *1* – Pb, *2* – Pb + 0.01% Cu, *3* – Pb + 0.05% Cu, *4* – Pb + 0.1% Cu, *5* – Pb + 0.5% Cu.

$$[H^0(T) - H^0(T_0)] = a(T - T_0) + \frac{\beta}{2}(T^2 - T_0^2) + \frac{\gamma}{3}(T - T_0^3) + \frac{\delta}{4}(T^4 - T_0^4),$$

$$[S^0(T) - S^0(T_0)] = a\ln\frac{T}{T_0} + \beta(T - T_0) + \frac{\gamma}{2}(T^2 - T_0^2) + \frac{\delta}{3}(T^3 - T_0^3),$$

$$[G^0(T) - G^0(T_0)] = [H^0(T) - H^0(T_0)] - T[S^0(T) - S^0(T_0)],$$

где $T_0 = 298.15$ K.

Результаты расчета температурных зависимостей изменения энтальпии, энтропии и энергии Гиббса с шагом 50 K представлены в табл. 5.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В режиме охлаждения по известной теплоемкости эталонного образца из меди рассчитана теплоемкость сплавов свинца с медью. Получены выражения, описывающие температурную зависимость теплоемкости и изменения термодинамических функций (энтальпия, энтропия, энергия Гиббса) сплавов в интервале температур 300–550 K. Показано, что с ростом температуры теплоемкость, энтальпия и энтропия сплавов увеличиваются, а значения энергии Гиббса уменьшаются. Добавки меди в изученном концентрационном

Таблица 5. Температурная зависимость изменений термодинамических функций сплавов системы Pb–Cu и эталона

T, K	Эталон	Содержание меди в свинце, мас. %				
		0.0	0.01	0.05	0.1	0.5
	$[H^0(T) - H^0(T_0^*)]$, кДж/кг					
300	0.712	0.24	0.24	0.24	0.25	0.26
350	20.132	6.61	6.70	6.84	6.97	7.25
400	39.867	13.11	13.31	13.61	13.89	14.49
450	59.888	19.87	20.19	20.66	21.09	22.07
500	80.167	26.89	27.33	28.00	28.58	29.95
550	100.682	34.07	34.60	35.47	36.19	37.97
	$[S^0(T) - S^0(T_0^*)]$, кДж/(кг K)					
300	0.0024	0.0008	0.0008	0.0008	0.0008	0.0009
350	0.0622	0.020	0.021	0.021	0.022	0.022
400	0.1149	0.038	0.038	0.039	0.040	0.042
450	0.1621	0.054	0.055	0.056	0.057	0.060
500	0.2048	0.068	0.070	0.071	0.073	0.076
550	0.2439	0.082	0.083	0.086	0.087	0.091
	$[G^0(T) - G^0(T_0^*)]$, $[G^0(T) - G^0(T_0^*)]$, кДж/кг					
300	−0.0022	−0.0007	−0.0007	−0.0008	−0.0008	−0.0008
350	−1.652	−0.544	−0.551	−0.562	−0.573	−0.595
400	−6.107	−2.007	−2.036	−2.078	−2.120	−2.206
450	−13.053	−4.300	−4.365	−4.459	−4.550	−4.745
500	−22.243	−7.359	−7.474	−7.642	−7.798	−8.144
550	−33.475	−11.131	−11.306	−11.567	−11.804	−12.341

$^*T_0 = 298.15$ K.

интервале (0.01–0.5 мас. %) увеличивают теплоемкость, энтальпию и энтропию свинца. При этом значение энергии Гиббса уменьшается. Изменение теплоемкости свинца при его легировании медью объясняется тем, что добавка изменяет форму и характер кристаллизаций твердого раствора свинца в сплавах. Как известно, структурные изменения приводят к значительным изменениям физических и механических свойств материалов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Дунаев Ю.Д.* Нерастворимые аноды из сплавов на основе свинца. Алма-Ата: Наука КазССР, 1978. 316 с.
2. *Муллоева Н.М., Ганиев И.Н., Махмадуллоев Х.А., Низомов З.* Теплофизические свойства и термодинамические функции сплавов системы Pb–Sr // Изв. Самарск. науч. центра РАН. 2014. Т. 16. № 6. С. 38.
3. *Муллоева Н.М., Ганиев И.Н., Махмадуллоев Х.А.* Теплофизические и термодинамические свойства свинца с щелочноземельными металлами. Германия: Lambert Acad. Publ., 2013. 66 с.
4. *Ганиев И.Н., Муллоева Н.М., Низомов З., Махмадуллоев Х.А.* Температурная зависимость теплофизических свойств и термодинамических функций сплавов системы Pb–Sr // Изв. Самарск. науч. центра РАН. 2014. Т. 16. № 6. С. 38.
5. *Ганиев И.Н., Муллоева Н.М., Низомов З., Обидов Ф.У., Иброхимов Н.Ф.* Температурная зависимость теплоемкости и термодинамических функций сплавов системы Pb–Ca // ТВТ. 2014. Т. 52. № 1. С. 147.

6. *Иброхимов С.Ж.* Влияние скандия на физико-химические свойства сплава АМг4 // Изв. Самарск. науч. центра РАН. 2014. Т. 16. № 4. С. 256.
7. *Ганиев И.Н., Сафаров А.Г., Одинаев Ф.Р., Якубов У.Ш., Кабутов К.* Температурная зависимость теплоемкости и изменений термодинамических функций сплава АЖ4.5 с оловом // Изв. вузов. Цветная металлургия. 2019. № 1. С. 50.
8. *Ганиев И.Н., Якубов У.Ш., Сангов М.М., Сафаров А.Г.* Влияния кальция на температурную зависимость удельной теплоемкости и изменений термодинамических функций алюминиевого сплава АЖ5К10 // Вестн. Казанск. технол. ун-та. 2018. Т. 21. № 8. С. 11.
9. *Якубов У.Ш., Ганиев И.Н., Махмадизода М.М., Сафаров А.Г., Ганиева Н.И.* Влияние стронция на температурную зависимость удельной теплоемкости и изменений термодинамических функций сплава АЖ5К10 // Вестн. СПГУТД. Сер. естеств. наук. 2018. № 3. С. 61.
10. *Ганиев И.Н., Отаджонов С.Э., Иброхимов Н.Ф., Махмудов М.* Температурная зависимость теплоемкости и изменений термодинамических функций сплава АК1, легированного стронцием // ТВТ. 2019. Т. 57. № 1. С. 26.
11. *Ганиев И.Н., Зокиров Ф.Ш., Сангов М.М., Иброхимов Н.Ф.* Влияние кальция на температурную зависимость теплоемкости и изменений термодинамических функций сплава АК12М2 // ТВТ. 2018. Т. 56. № 6. С. 891.
12. *Зиновьев В.Е.* Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. Спр. изд. М.: Металлургия, 1989. 384 с.

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР, 2021, том 59, № 1, с. 62–68

УДК 666.7

ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В КОМПОЗИЦИОННОМ МАТЕРИАЛЕ С ОРГАНИЧЕСКОЙ МАТРИЦЕЙ, НАПОЛНЕННОЙ ВОЛОКНАМИ ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ

© 2021 г. Е. Н. Каблов[1, *], В. Г. Бабашов[1], Ю. А. Балинова[1], В. Г. Максимов[1]

[1]ФГУП "Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов" ГНЦ РФ, Москва, Россия

**E-mail: admin@viam.ru*

Поступила в редакцию 19.12.2019 г.
После доработки 06.07.2020 г.
Принята к публикации 14.10.2020 г.

В статье приведены результаты исследования поведения композиционного материала, представляющего собой матрицу на основе органического полимера, наполненную волокнами частично стабилизированного диоксида циркония в условиях воздействия воздуха при температурах выше 2000°C. Выявлены фазовые и структурные изменения, приводящие к образованию новой низкотемпературной фазы при сохранении волокнистой структуры материала. Проведенное исследование позволяет оценить возможность использования композиционного материала с органической матрицей, армированной тугоплавкими волокнами оксида циркония в условиях кратковременного воздействия экстремально высоких температур.

DOI: 10.31857/S0040364421010063

ВВЕДЕНИЕ

Стремление к освоению космического пространства выдвигает повышенные требования к надежности материалов, в том числе в условиях аварийных ситуаций, при одновременном соблюдении весовой эффективности. Выполнение поставленных задач требует реализации нестандартных решений при создании новых конструкционных композиционных, легких и жаропрочных сплавов, современных функциональных материалов, обладающих прорывными свойствами, опережающими современный уровень [1–4].

Работы по созданию жаропрочных легковесных высокотермостойких материалов, рассчитанных на эксплуатацию в широком температурном диапазоне, получили новый импульс развития с созданием волокон на основе тугоплавких оксидов алюминия, кремния, циркония [5–10]. В настоящее время разработано большое количество композиционных материалов, рассчитанных на эксплуатацию при температурах от –130°C до +1700°C в окислительных средах. Оксидные волокна применяются в качестве наполнителей, в качестве матриц используется широкий круг соединений, в том числе полимерные органические компоненты. Сочетание компонентов позволяет расширить области применения материалов на основе оксидных волокон, комбинируя конструкционные свойства с функциональными [11–13].

Цель данной работы – изучение поведения композиционного материала на основе полимерной матрицы, наполненной тугоплавкими волокнами оксида циркония, в условиях воздействия высокотемпературного воздушного потока с температурой выше 2000°C для оценки его надежности в условиях потенциальной аварийной ситуации, сопровождающейся экстремальным повышением температуры. Композиционный материал обладает малой плотностью (не выше 1300 кг/м^3) и может быть применен в малонагруженных конструкциях летательных аппаратов.

Работа выполнена в рамках реализации комплексного научного направления 14.3 "Многофункциональные теплозащитные и теплоизоляционные материалы".

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Объектом исследований является композиционный материал, в котором матрицей выступает новолачная фенольная смола окислительного отверждения. Материал наполнен волокнами тетрагонального диоксида циркония, частично стабилизированного оксидом иттрия, степень наполнения составляет 40 мас. %. Испытания материала проводились в плазме воздуха, генерируемой плазмотроном В-104 мощностью 100 кВт (ИПМех РАН). В ходе эксперимента изучались изменения в фазовом составе образцов, происходящие при воздействии стационарного теплового

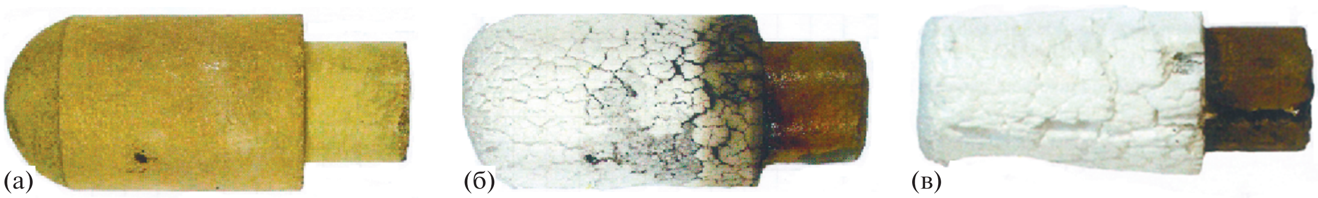


Рис. 1. Виды исходного образца (а) и образцов после проведения испытаний при продолжительности воздействия 60 с (б) и 500 с (в).

потока с температурой выше 2000°С продолжительностью от 60 до 300 с. Для испытания изготавливались образцы в виде цилиндров с полусферическим дном. Высота цилиндра (длина) составляла 45 мм, диаметр – 20 мм.

Исследования фазового состава и микроструктуры образцов после испытаний выполнялись методами рентгенофазового анализа с использованием рентгеновского дифрактометра ДРОН-3, оптической электронной микроскопии с помощью многофункционального комплекса исследований "Olimpus", сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) с использованием электронного микроскопа "Hitachi С-405".

РЕЗУЛЬТАТЫ

На рис. 1 изображены виды исходного образца и образцов после проведения испытаний.

Проведен анализ поведения образцов исследуемого материала при испытаниях, изучено изменение геометрии и массы образцов, структуры и состава материала после испытаний.

В процессе испытаний образцов материала был отмечен унос массы и линейный унос как вдоль оси образца, так и с боковой поверхности (рис. 2).

Высокая скорость уноса массы в первые 150 с высокотемпературного воздействия вызвана деструкцией и уносом продуктов распада органического компонента. Дальнейшее изменение массы, происходящее с более низкой скоростью, вызвано уносом оксидной составляющей материала с боковой поверхности образца.

Изменение высоты образца (линейный унос) в течение 300 с происходит равномерно, затем замедляется, что, видимо, связано с завершением выделения органического компонента и началом плавления оксида циркония.

Диаметр образца изменяется по длине неравномерно, что создает дополнительные погрешности при его оценке. В некоторых случаях в зоне наибольших температур на образце отмечались следы плавления (рис. 3). Для определения изменения образца по диаметру замеры проводились в нескольких местах образца, а при расчете Δd использовалось минимальное значение диаметра из измеренных. Установлено, что после 300 с испытаний максимальное уменьшение диаметра образцов составляет 22%, или 4.5 мм. Максимальное уменьшение длины образца – 13%, или 6 мм.

На рис. 3 представлен внешний вид образца (вид сверху и сбоку) после испытания в течение 300 с. На образце можно выделить три основные

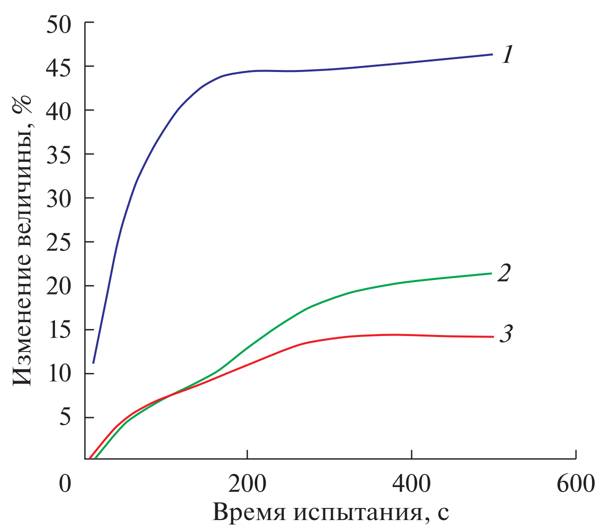


Рис. 2. Зависимости изменения массы (*1*), длины образца по оси потока (*2*) и диаметра образца (*3*) от времени испытаний.

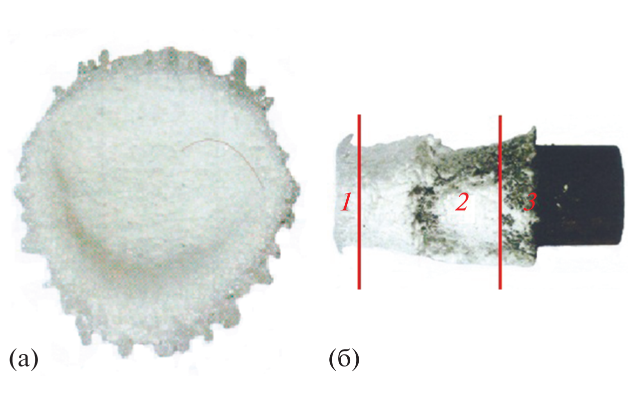


Рис. 3. Внешний вид образца после испытания: (а) – вид сверху со следами плавления (по направлению потока, зона *1*), (б) – вид сбоку.

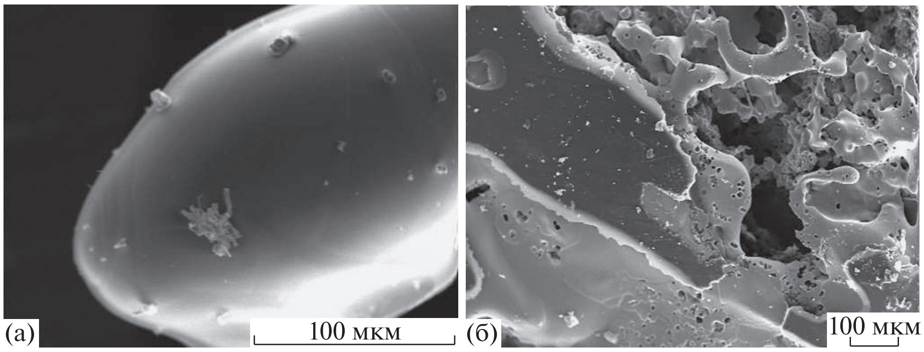


Рис. 4. Фотография края расплавленного участка (а) и его внутренней поверхности (б).

зоны воздействия теплового потока. Наиболее “горячие” зоны материала сильно деградированы. В части образца, подверженной непосредственному воздействию потока ионизированного воздуха с максимальной температурой, наблюдается плавление оксидной составляющей материала (зона *1*). На боковых поверхностях под воздействием температуры образовалась пористая корка белого цвета, легко распадающаяся на мелкие частицы при механическом воздействии, и прочная сердцевина темного цвета (зона *2*). Наиболее “холодная” зона представляет собой мало измененный материал черного цвета (зона *3*).

Рассмотрим морфологию и фазовый состав деградированных поверхностей материала. На рис. 4 представлены фото СЭМ оплавленного участка образца (зона *1* на рис. 3). Следы плавления хорошо видны как на фотографиях краев оплавленного участка в виде капель (рис. 4а), так и на внутренней поверхности оплавленной части (рис. 4б). На основании исследования морфологии участка можно сделать вывод, что под воздействием потока происходило не только плавление оксидной составляющей, но и унос капель расплава потоком.

При оценке структуры зоны *1* методом оптической микроскопии установлено, что расплавленный участок состоит из крупных кристаллов размером от 2 до 10 мкм и более крупных сростков кристаллических образований (рис. 5), свидетельствующих о быстром протекании процесса рекристаллизации.

Исследование рентгенофазового состава (рис. 6, дифрактограмма *1*) показало, что верхняя часть оплавленного участка состоит из тетрагонального и кубического диоксидов циркония. С учетом того что применяемый диоксид циркония в исходном состоянии имеет единственную фазу – тетрагонального оксида циркония, появление кубической модификации свидетельствует об обогащении расплава зоны *1* стабилизирующей добавкой – оксидом иттрия. Кубическая модификация проявляется на дифрактограмме (рис. 6, кривая *1*) прежде всего как расщепление линии 100%-ной интенсивности фаз ZrO_2 на линию 2.95 Å тетрагональной фазы и 2.97 Å кубической фазы.

Внутренняя поверхность оплавленного слоя, обращенная внутрь материала, напротив, обеднена стабилизатором, на что указывает наличие на

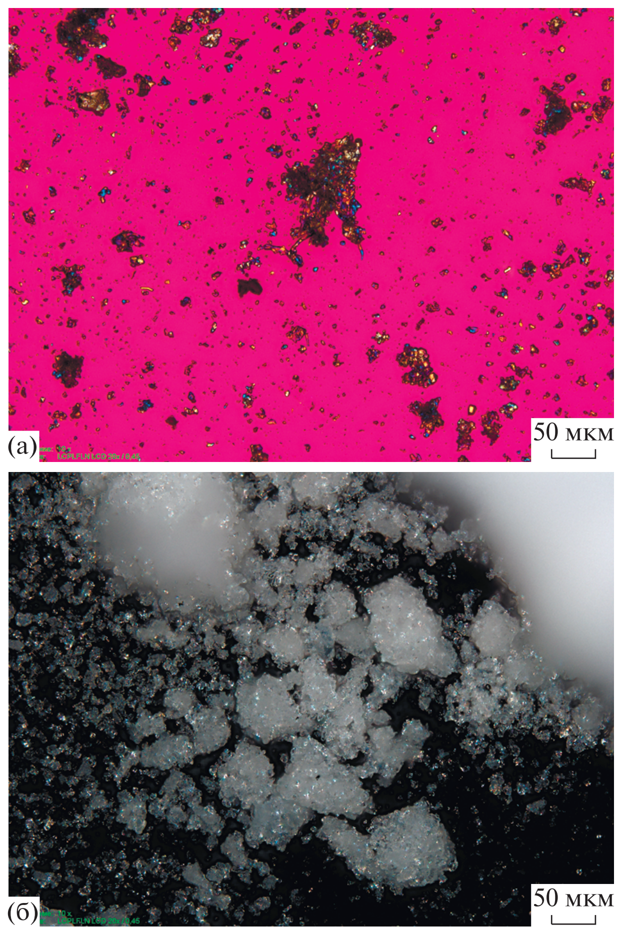


Рис. 5. Кристаллическая структура оплавленного участка образца: (а) – в иммерсионной жидкости, (б) – темное поле.

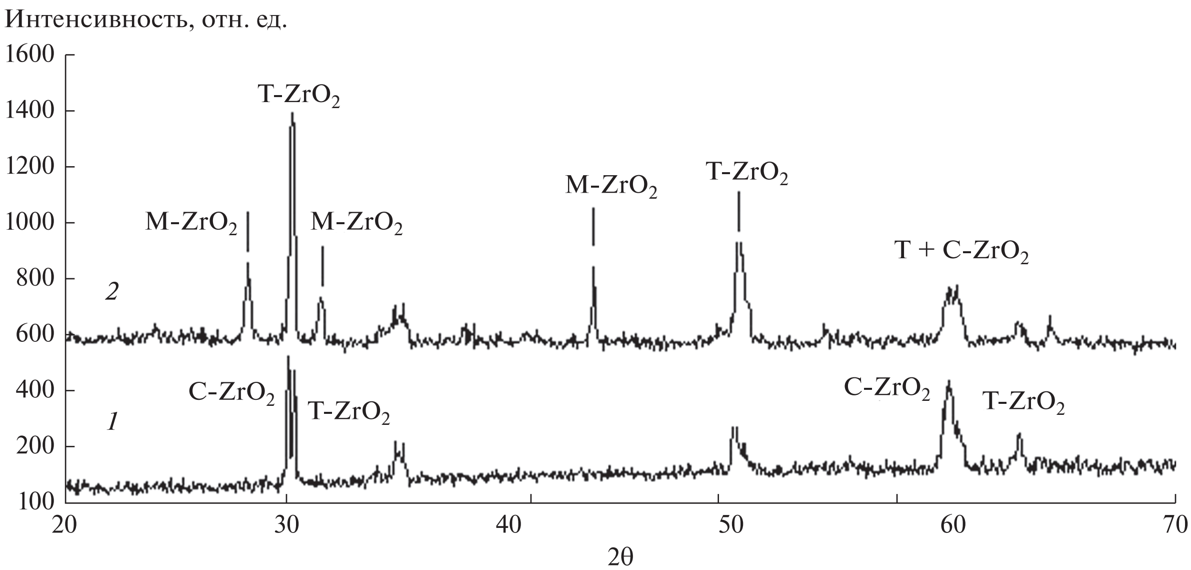


Рис. 6. Дифрактограммы оплавленного участка образца снаружи (*1*) и внутри (*2*).

дифрактограмме (рис. 6, кривая *2*) характерных пиков моноклинной фазы оксида циркония.

По мере удаления от наиболее горячей зоны *1* образовавшийся на боковых поверхностях образца высокопористый механически непрочный слой (зона *2*) белого цвета имеет толщину от 1 до 4 мм. В процессе проведения испытания отрыва частей покрытия и его разрушения не наблюдалось. Это позволяет предположить, что растрескивание и потеря прочности слоя возникают при остывании образца. Рентгенофазовый анализ этого слоя показал присутствие моноклинной фазы ZrO_2 (рис. 7), которая приводит к разрушению слоя при остывании. Моноклинная фаза образуется из-за обеднения поверхностного слоя зоны *2* стабилизатором. Обеднение слоя зоны *2* и обогащение слоя зоны *1* стабилизатором говорят о распаде твердого раствора и диффузии стабилизатора в область наибольшего теплового потока. Диффузия стабилизатора протекает неравномерно, о чем свидетельствует значительная разница в рентгенограммах разных участков зоны *2* (рис. 7). В механически непрочном, осыпающемся слое присутствует значительное количество моноклинной фазы диоксида циркония, а в более прочном боковом слое, оставшемся на образце, моноклинная фаза выражена значительно слабее.

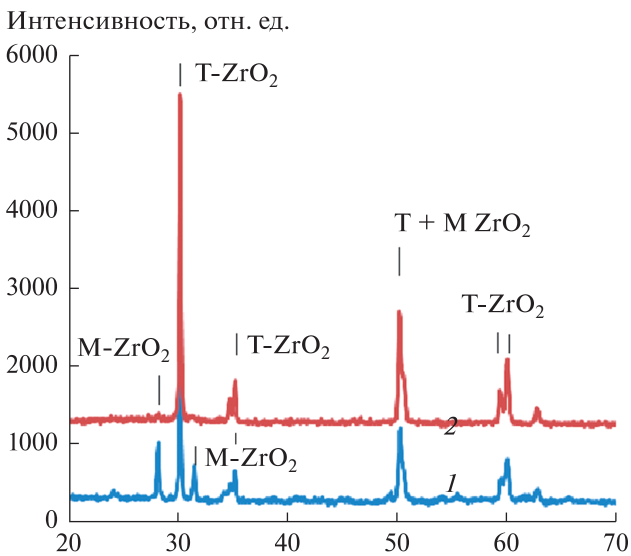


Рис. 7. Рентгенограмма частиц бокового слоя, облетевшего с образца после снятия со стенда (*1*) и оставшегося на образце (*2*).

Микроструктура хрупкого поверхностного слоя зоны *2* представлена на рис. 8. Структура слоя в основном имеет высокую пористость. Морфология поверхности волокон сильно изменена вследствие рекристаллизации. Рельеф волокон бугристый за счет крупных зерен оксида циркония, размер которых достигает нескольких микрометров, что свидетельствует о высокой температуре в исследуемой зоне.

Удаляясь от точки воздействия теплого потока, перейдем к рассмотрению боковой поверхности зоны *3* – наиболее холодного участка материала. В этой зоне поверхностный слой материала также претерпел деградацию, цвет боковой поверхности преимущественно белый – за счет выгорания полимерного компонента. Морфология образца представлена частично деструктированными волокнами с выраженными признаками

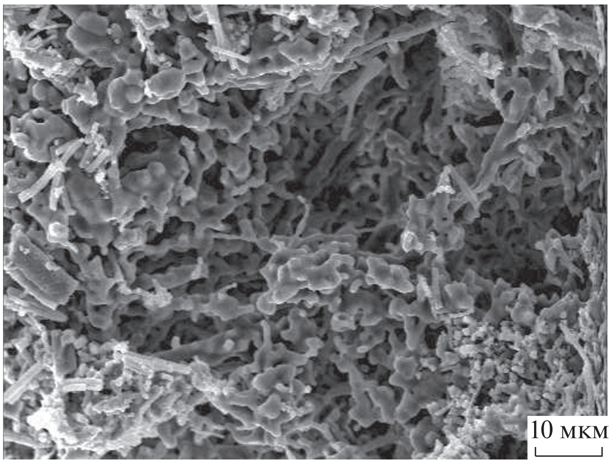


Рис. 8. Структура белого слоя зоны *2* боковой поверхности образца; СЭМ.

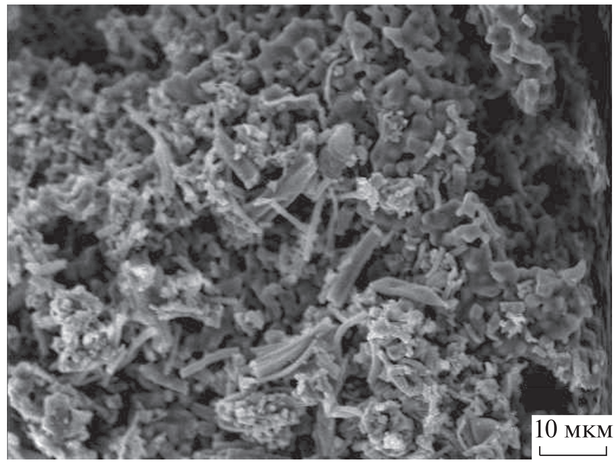


Рис. 9. Структура оксидного слоя боковой поверхности холодной зоны *3*.

рекристаллизации. В слое присутствуют волокна с неизмененной морфологией (рис. 9).

По результатам проведенных исследований сделан основной вывод, что поверхностный слой материала толщиной до 5 мм претерпевает необратимые изменения структуры под воздействием потока ионизированного воздуха. Полимерная матрица удаляется с поверхности и приповерхностных слоев материала, поверхность теряет механическую прочность. В поверхностном слое материала под воздействием температуры происходят разрушение структуры твердого раствора оксида циркония со стабилизатором и перераспределение последнего по длине образца. Волокнистая структура сильно изменена за счет роста зерен и спекания волокон между собой.

Рассмотрим морфологию и фазовый состав внутреннего слоя (сердцевины) материала. Сердцевина имеет темный цвет и является механически прочной, сохраняет волокнистую структуру после воздействия температуры.

Исследование сердцевины проводилось послойно согласно схеме, представленной на рис. 10.

Фазовый состав сердцевины меняется по мере удаления от точки воздействия теплового потока (рис. 11), что, видимо, соответствует распределению температуры в образце во время испытаний.

Из анализа фазового состава установлено, что фаза карбида циркония присутствует во всем объеме сердцевины образца, и наибольшее ее количество находится в наиболее высокотемпературной зоне (слои *1*–*3*, рис. 10), где практически отсутствует фаза диоксида циркония. В более "холодных" слоях *4*, *5* фазовый состав в основном представлен фазой тетрагонального диоксида циркония с незначительными следами карбида циркония в четвертом слое.

Микроструктура сердцевины между слоями *1*–*3* представлена в основном волокнами с неизмененной морфологией, что говорит о значительном ослаблении температуры за счет поверхностных слоев (рис. 12а). На фотографиях слоев *1*–*3* можно наблюдать нитевидные кристаллы, предположительно карбида циркония (рис. 12б). Нитевидные кристаллы появляются повсеместно и формируют вторичную структуру сердцевины. В слое *4* нитевидные кристаллы отсутствуют, микроструктура представлена целыми волокнами, соединенными друг с другом полимерным компонентом, что свидетельствует о температуре значительно ниже 1000°C (рис. 12в).

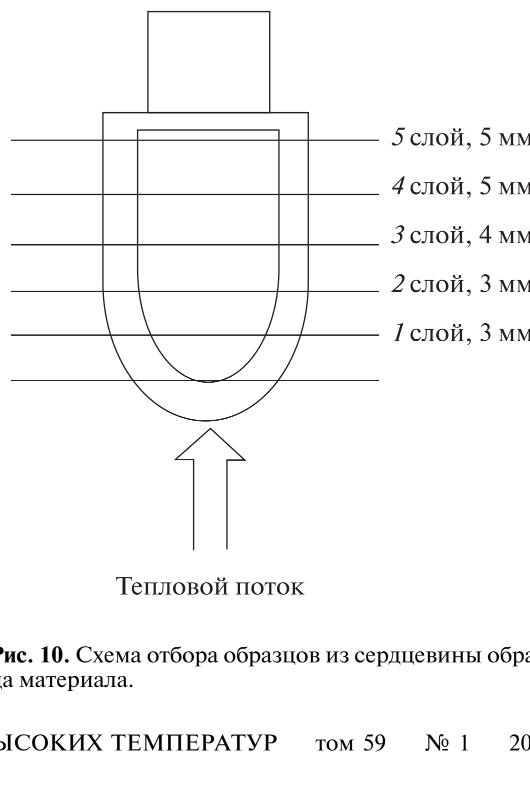


Рис. 10. Схема отбора образцов из сердцевины образца материала.

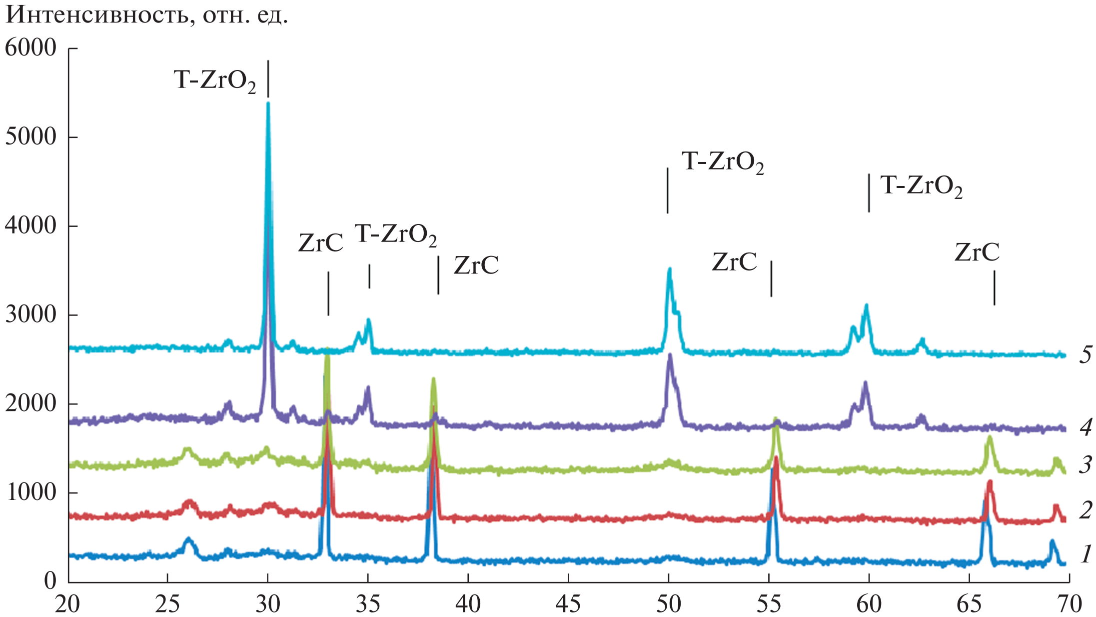


Рис. 11. Дифрактограммы фазового состава сердцевины образца по слоям: *1*–*5* – слои с 1 по 5 соответственно.

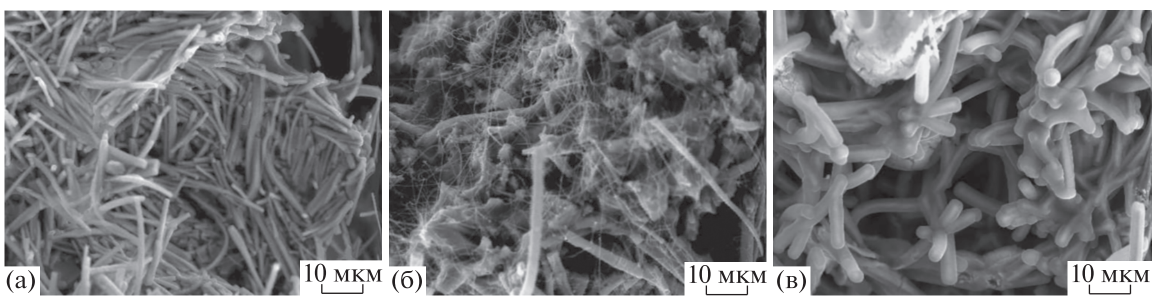


Рис. 12. Микроструктура сердцевины образца: (а) – между слоями 1 и 2; (б) – между слоями 2 и 3, (в) – слой 4.

ОБСУЖДЕНИЕ

Испытания образцов композиционного материала в потоке ионизированного воздуха показали его способность выдерживать экстремальные воздействия потока воздуха без критического разрушения образцов.

Оценивая полученные результаты, можно сделать вывод, что под воздействием теплового потока происходит выгорание и частичное коксование материала матрицы органического полимера, которое в основном завершается на 130–170 с воздействия. После чего начинается плавление диоксида циркония в точке наибольшей температуры с образованием вязкого расплава, обладающего высокой скоростью испарения [14]. При этом в материале образца, где температура ниже температуры плавления, происходит взаимодействие волокон тетрагонального ZrO_2 с продуктами коксования органического полимера, которое выражается в восстановлении ZrO_2 углеродом с образованием карбида циркония.

При этом волокнистая макро- и микроструктура материала в основном сохраняется. Это свидетельствует о том, что превращения происходят со значительным поглощением теплоты.

На открытых поверхностях образца, непосредственно соприкасающихся с потоком воздуха максимальной температуры, карбид циркония не успевает образовываться вследствие быстрого выгорания углеродсодержащей составляющей. По мере удаления от горячей зоны, вероятно, происходит первичное образование карбида циркония в поверхностных слоях и его последующее окисление, которое приводит к разрушению твердого раствора ZrO_2 со стабилизатором, обеднению слоя стабилизатором и образованию моноклинной фазы оксида циркония при остывании образца. Полиморфный переход сопровождается объемными изменениями, приводящими к потере механической прочности [15] и образованию механически не связанного с основным материалом слоя. Высвобожденный стабилизатор, расплавляясь, перемещается в нижнюю часть образца, где образуется кубический оксид циркония.

Присутствие ZrC во внутренних слоях материала свидетельствует о малой газопроницаемости материала в условиях испытания. При этом реакция образования ZrC очевидно протекает на поверхности волокон с сохранением их морфологии и образованием вторичных эпитаксиальных образований в виде нитевидных кристаллов, которые способствуют повышению термостойкости материала.

Критического разрушения образца при высоких температурах в потоке и после прекращения воздействия не происходит, волокнистая высокопористая структура сохраняется, что способствует сохранению теплозащитных свойств материала.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, проведенное исследование позволяет положительно оценить возможность использования композиционного материала с органической матрицей, наполненной тугоплавкими волокнами оксида циркония, в качестве теплозащитного материала, работающего в окислительной среде.

Авторы выражают глубокую благодарность коллегам Басаргину О.В., Люлюкиной Г.Ю., Варрик Н.М., Гордееву А.Н., Колесникову Н.Ф. за неоценимую помощь в проведении работы и ценные замечания при рассмотрении результатов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Каблов Е.Н.* Материалы нового поколения – основа инноваций, технологического лидерства и национальной безопасности России // Интеллект и технологии. 2016. № 2(14). С. 16.
2. *Каблов Е.Н.* Ключевая проблема – материалы // Тенденции и ориентиры инновационного развития России. М.: ВИАМ, 2015. С. 458.
3. *Buhl H.* Advanced Aerospace Materials. Springer Science & Business Media, 2012. 373 p.
4. *M'Saoubi R., Sim W.-M.* High Performance Cutting of Advanced Aerospace Alloys and Composite Materials // CIRP Annals. 2015. V. 64. P. 557. https://doi.org/10.1016/j.cirp.2015.05.002
5. *Балинова Ю.А., Варрик Н.М., Истомин А.В., Люлюкина Г.Ю.* Волокна диоксида циркония и методы их получения // Химические волокна. 2018. № 1. С. 12.
6. *Щетанов Б.В., Ивахненко Ю.А., Каблов Е.Н., Щеглова Т.М.* Способ получения высокотемпературного волокна на основе оксида алюминия. Патент РФ № 2212388, заявл. 19.11.2001, опубл. 20.09.2003. 7 с.
7. *Zhang L., Jiang D.* High Temperature Ceramic Matrix Composites 8. N.Y.: John Wiley & Sons, 2013. V. 248. 716 p.
8. *Балинова Ю.А., Бучилин Н.В., Колышев С.Г.* Структура и свойства пористого композиционного материала на основе дискретных волокон оксида циркония и матрицы SiO_2 // Все материалы. Энциклопедический справочник. 2017. № 3. С. 2.
9. *Балинова Ю.А., Бучилин Н.В., Басаргин О.В., Бабашов В.Г.* Исследование пластичности функциональных волокнистых оксидных композиционных материалов на основе волокон тетрагонального ZrO_2 // Огнеупоры и техническая керамика. 2016. № 1–2. С. 19.
10. *Бакланова Н.И., Уткин А.В.* Термостойкая система теплозащиты поверхности гиперзвуковых летательных и возвращаемых космических аппаратов. Патент РФ № 2509040, заявл. 22.03.2012; опубл. 27.09.2013. Бюл. № 27. 8 с.
11. *Chen Y., Hong C., Chen P.* The Effects of Zirconium Diboride Particles on the Ablation Performance of Carbon–phenolic Composites under an Oxyacetylene Flame // Iran. J. Polym. Sci. Technol. 2018. V. 30. P. 517.
12. *Liu Y., Yang S., He G.* An Overall Ablation Model of Ethylene-Propylene–diene Monomer Based on Porous Characteristics in Char Layer // Adv. Mech. Eng. 2016. https://doi.org/10.1177/1687814016632415
13. Properties of Ablation and Insulation Materials. National Aeronautics and Space Administration NASA, 2019. V. 1. 82 p.
14. *Каблов Е.Н., Фоломейкин Ю.И., Столярова В.Л., Лопатин С.И.* Масс-спектрометрическое исследование испарения керамики высшей огнеупорности // Докл. РАН. 2015. Т. 463. № 1. С. 63.
15. *Балкевич В.Л.* Техническая керамика. М.: Стройиздат, 1984. 254 с.

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР, 2021, том 59, № 1, с. 69–73

УДК 539.424

УСТОЙЧИВОСТЬ КРИСТАЛЛА ПРИ ТЕМПЕРАТУРАХ НИЖЕ ТЕМПЕРАТУРЫ КОНЕЧНОЙ ТОЧКИ ЛИНИИ ПЛАВЛЕНИЯ: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

© 2021 г. В. Г. Байдаков[1, *], С. П. Проценко[1]

[1]*Институт теплофизики, Уральское отделение РАН, Екатеринбург, Россия*

**E-mail: baidakov@itp.uran.ru*

Поступила в редакцию 11.02.2020 г.
После доработки 22.04.2020 г.
Принята к публикации 18.06.2020 г.

Рассмотрены условия устойчивости ГЦК-кристалла относительно бесконечно малых и конечных изменений параметров состояния при температурах ниже температуры конечной точки линии плавления. В процессе молекулярно-динамического моделирования определены модули простого μ и тетрагонального μ' сдвигов, всестороннего K и одностороннего $\tilde{K}$ сжатия леннард-джонсовского кристалла. Показано, что кристаллическое состояние сохраняет устойчивость относительно бесконечно малых возмущений и при $K \le 0$. Здесь, как и при $K > 0$, распад кристаллической фазы протекает по механизму спонтанного зарождения и роста кавитационных полостей.

DOI: 10.31857/S0040364420060046

ВВЕДЕНИЕ

Фазовые переходы первого рода предполагают существование метастабильных состояний. Две фазы, метастабильные по отношению к некоторой третьей фазе, могут равновесно сосуществовать друг с другом на плоской межфазной границе [1]. Последнее означает, что в однокомпонентной системе каждая из линий фазового равновесия может быть продолжена за тройную точку. Метастабильное продолжение линии плавления встречается в области отрицательных давлений со спинодалью растянутой жидкости [2, 3]. Точка встречи этих линий является особой для жидкой фазы. В то же время она ничем не выделяется для сосуществующей с ней кристаллической фазы.

Твердые тела по-разному реагируют на бесконечно малые однородные и неоднородные возмущения плотности. Это связано с тем, что при всяком неоднородном изменении плотности в твердом теле возникают сдвиговые деформации, медленно убывающие с расстоянием [4].

Состояние кубического кристалла, находящегося под гидростатическим давлением p, будет устойчивым относительно однородных деформаций, если выполнены условия [5]:

$$\begin{gathered} K = (\tilde{c}_{11} + 2\tilde{c}_{12})/3 > 0, \quad \mu = \tilde{c}_{44} > 0, \\ \mu' = (\tilde{c}_{11} - \tilde{c}_{12})/2 > 0. \end{gathered} \tag{1}$$

Здесь K – модуль всестороннего сжатия, являющийся мерой сопротивления вещества по отношению к объемной деформации; μ, μ' – модули простого и тетрагонального сдвигов, характеризующие отклик твердого тела на статические сдвиговые деформации; $\tilde{c}_{11}$, $\tilde{c}_{12}$, $\tilde{c}_{44}$ – эффективные упругие постоянные Бирча, функции температуры и давления.

Неравенства (1) известны как борновские критерии устойчивости [6]. Они нарушаются на границе существенной неустойчивости кристалла по отношению к однородным деформациям, которая определяется первым обратившимся в нуль модулем упругости. Нарушение первого критерия в (1) обычно называется спинодальной неустойчивостью.

Деформации и напряжения в твердых телах, вызываемые тепловым движением, являются, как правило, неоднородными. Неоднородные флуктуации плотности в твердом теле – это тепловые продольные звуковые волны, которые зависят от волнового вектора $\vec{q}$ [4]. Если ось z декартовой системы координат направлена вдоль вектора $\vec{q}$, пространственно неоднородной флуктуации отвечает лишь одна отличная от нуля компонента тензора деформаций $u_{zz} = \partial u_z / \partial z \equiv u$. Средний квадрат флуктуаций фурье-компонента смещения u есть [4]

$$\langle u(\vec{q}) \cdot u(-\vec{q}) \rangle \approx \frac{k_{\rm B}T}{V} \left[\tilde{K} + \mathbb{O}(q^2) \right]^{-1}, \tag{2}$$

где k_B – постоянная Больцмана, V – объем кристалла, $\tilde{K}$ – модуль одностороннего сжатия, зависящий от направления деформации.

Для главных направлений ГЦК-кристалла имеем [7]

$$\tilde{K}[100] = K + 4\mu'/3, \quad \tilde{K}[110] = K + \mu'/3 + \mu,$$
$$\tilde{K}[111] = K + \mu/3.$$

Таким образом, в анизотропном твердом теле в пределе $q \to 0$ при $K = 0$, когда $\mu > 0$ и $\mu' > 0$, пространственно-неоднородные флуктуации плотности конечны.

Здесь анализируются только длинноволновые флуктуации ($q \ll \xi^{-1}$, где ξ – корреляционная длина), поэтому член, пропорциональный q^2, в (2) в явном виде не выписан и далее не рассматривается.

Сохраняя восстановительную реакцию на бесконечно малые изменения параметров состояния, метастабильная система проявляет неустойчивость относительно локальных возмущений определенного масштаба [1, 8]. Потеря устойчивости происходит в отдельных "точках". Эти "точки роста", или жизнеспособные зародыши, могут формироваться как на дефектах, неоднородностях в строении твердых тел, так и на порождаемых в процессе теплового движения флуктуациях плотности. Спонтанное зародышеобразование описывается классической теорией зародышеобразования (КТЗ), которая определяет число жизнеспособных зародышей, образующихся в единице объема за единицу времени (частоту зародышеобразования) [8]:

$$J = \rho Z D \exp(-W_*/k_B T), \tag{3}$$

где ρ – плотность кристалла, Z – неравновесный фактор Зельдовича, D – коэффициент диффузии зародышей в пространстве их размеров, W_* – работа образования критического зародыша.

В неограниченной изотропной упругой среде радиус критической полости [9] равен

$$R_* = -\frac{2\gamma_e}{p\left[1 - 2p\langle\mu\rangle/\left(K + 4\langle\mu\rangle/3\right)^2\right]}, \tag{4}$$

а работа ее образования

$$W_* = \frac{16\pi\gamma_e^3}{3p^2\left[1 - 2p\langle\mu\rangle/\left(K + 4\langle\mu\rangle/3\right)^2\right]^2}. \tag{5}$$

Здесь γ_e – эффективная поверхностная свободная энергия на межфазной границе жидкость–газ, $\langle\mu\rangle$ – сдвиговый модуль изотропного твердого тела.

Если определяющим механизмом формирования кавитационных полостей является выход вакансий, для коэффициента диффузии зародышей имеем [10]

$$D = n_{A_*}\nu_0 \exp\left(-E'/k_B T\right),$$

где n_{A_*} – число частиц на поверхности критического зародыша, ν_0 – частота колебаний частиц, E' – энергия активации диффузии в кристалле. Частота колебаний ν_0 оценивается по соотношению $h\nu_0 \approx k_B T$, где h – постоянная Планка.

В данной работе методом молекулярно-динамического (МД) моделирования исследуется устойчивость леннард-джонсовского (ЛД) ГЦК-кристалла относительно бесконечно малых и конечных изменений параметров состояния при температурах ниже температуры конечной точки линии плавления T_K.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Исследуемые системы содержали от 2048 до 108 000 взаимодействующих частиц, которые размещались в кубической ячейке в узлах ГЦК-решетки. На границы ячейки налагались периодические граничные условия.

Свойства кристалла рассчитывались в *NVT*-ансамбле с использованием классического МД-кода LAMMPS [11]. Процесс зарождения и роста новой фазы протекал в условиях постоянства объема и энергии (*NVE*-ансамбль).

Устойчивость кристаллической фазы исследовалась при температурах $T < T_K = 0.529$ [2] по изотермам $T = 0.2$, 0.3 и 0.4. Здесь и далее рассчитываемые величины приводятся в безразмерном виде. Единицами приведения выступают параметры потенциала σ, ε, масса частицы m и постоянная Больцмана k_B: единица длины σ, температуры ε/k_B, давления ε/σ^3, плотности σ^{-3}, времени $\sigma(m/\varepsilon)^{1/2}$. Парный потенциал ЛД обрезался на расстоянии $r_c = 6.58\sigma$ от центра взаимодействия.

Заход в метастабильную область осуществлялся пошаговым уменьшением плотности путем увеличения длины ребер ячейки и соответствующего масштабирования координат частиц. Результаты расчета давления в кристаллической фазе представлены на рис. 1. При $(\partial p/\partial\rho)_T < 0$ МД-моделирование проводилось до тех пор, пока не происходил фазовый распад кристалла.

Для определения границы идеальной прочности нагруженного ГЦК-кристалла рассчитывались эффективные упругие постоянные $\tilde{c}_{\alpha\beta}$, которые учитывают как изменение свободной энергии Гельмгольца при деформации вблизи исходного состояния с заданным значением p, так и работу против гидростатического давления силами, обусловленными этой деформацией. Процедура расчета постоянных $\tilde{c}_{\alpha\beta}$ подробно описана в работах [12–14].

Результаты расчета модулей всестороннего сжатия, простого и тетрагонального сдвигов ЛД ГЦК-кристалла при всех температурах свидетельствуют, что первым обращается в нуль объемный модуль. Модули μ и μ' сохраняют при этом конечные, положительные значения. Это отличает поведение устойчивости кристаллической фазы в области температур $T < T_K$ от области $T > T_K$, где потеря устойчивости ГЦК-кристаллом связана с тетрагональным сдвигом ($\mu' = 0$) [14].

Экстраполяция результатов расчета модулей одностороннего сжатия для трех главных направлений ГЦК-решетки в ту часть метастабильной области кристаллической фазы, где МД-вычисления проведены быть не могут, свидетельствует, что первым обращается в нуль модуль $\tilde{K}$[100]. Это происходит за спинодалью ($K = 0$). На спинодали кристаллическая фаза сохраняет восстановительную реакцию на бесконечно малые возмущения плотности.

Кинетика разрушения кристаллического состояния исследовалась при растяжениях, отмеченных на рис. 1 точками *4*. Во всех случаях распад кристаллической фазы связан с образованием и ростом локальной неоднородности. Начало разрушения кристалла регистрировалось по скачку давления. Время появления жизнеспособной локальной неоднородности τ связывалось с моментом, когда давление в кристалле на 2–3% превышало его среднее значение в однородном состоянии.

При температурах, близких к T_K, жизнеспособная локальная неоднородность имела вид кавитационной полости. Полость свободна от частиц, а скорость ее роста почти в десять раз выше, чем скорость роста жидкой капли в случае плавления кристалла [14]. Для фиксированных значений температуры и давления распределение времен ожидания появления первой жизнеспособной полости описывается законом Пуассона (рис. 2). Среднее время ожидания полости $\overline{\tau}$ рассчитывалось как среднее арифметическое по числу событий зародышеобразования N. Среднее время связано с частотой зародышеобразования соотношением $J = \left(\overline{\tau} V\right)^{-1}$.

Частота зародышеобразования как функция давления представлена на рис. 3, где данные МД-моделирования сопоставляются с результатами расчета по КТЗ в рамках модели сферического зародыша в изотропном твердом теле. Сдвиговый модуль изотропного твердого тела $\langle\mu\rangle$ определял-

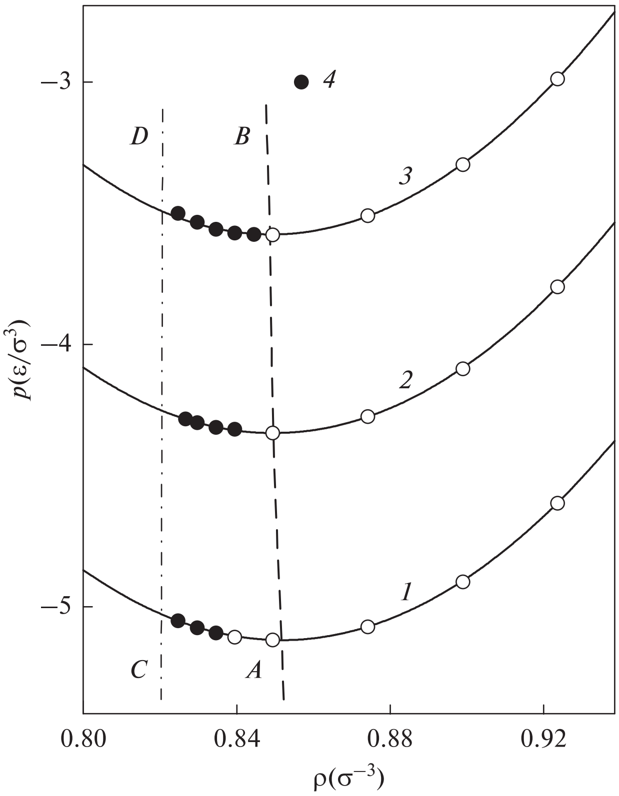


Рис. 1. Изотермы ЛД ГЦК-кристалла: *1* – $T = 0.2$, *2* – 0.3, *3* – 0.4; AB – спинодаль кристалла ($K = 0$), CD – граница существенной неустойчивости, определяемая условием $\tilde{K}[100] = 0$; *4* – состояния, в которых исследовалась кинетика зародышеобразования.

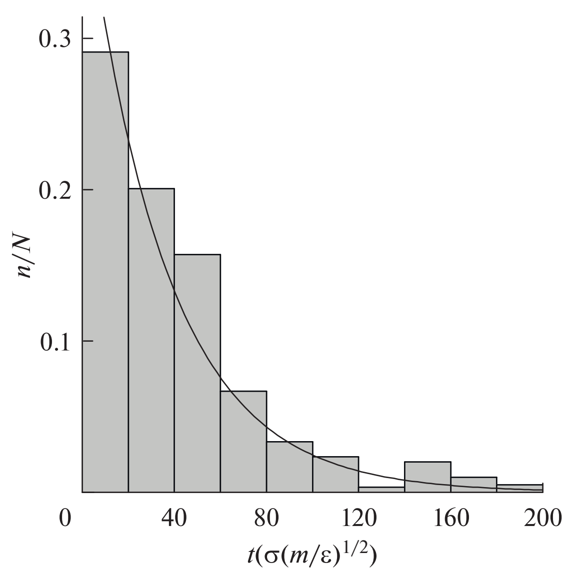


Рис. 2. Распределение времен ожидания появления первой жизнеспособной полости в растянутом кристалле из 32000 частиц при $T = 0.4$, $\rho = 0.835$, $N = 154$, $\overline{\tau} = 35.64$; сплошная кривая – распределение Пуассона.

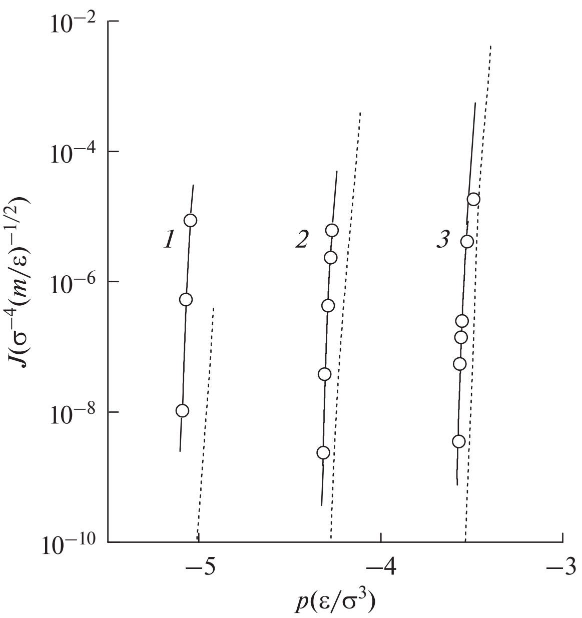


Рис. 3. Барическая зависимость частоты зародышеобразования в ЛД ГЦК-кристалле при температурах: *1* – $T = 0.2$, *2* – 0.3, *3* – 0.4; пунктирные линии – КТЗ ($\gamma_e = \gamma_{e\infty}$).

ся по данным о модулях μ и μ' ГЦК-кристалла как $\langle\mu\rangle = (3\mu + 2\mu')/5$ [15]. При нахождении работы образования и радиуса сферического зародыша использовались значения поверхностной свободной энергии на плоской межфазной границе кристалл–газ $\gamma_{e\infty}$ [16].

При существенном, до семи порядков по частоте нуклеации ($T = 0.2$), расхождении данных МД-моделирования и теории (рис. 3) имеет место близость наклонов изотерм J, т.е. производных $(d\ln J/dp)_T$.

С использованием МД-данных о частоте нуклеации рассчитаны работа образования критического зародыша (уравнение (3)), поверхностная свободная энергия γ_{e*} и радиус R_* критического зародыша (уравнения (4), (5)). При $T = 0.4$ и $\rho = 0.845$ получены значения $R_* = 0.68$, $\gamma_{e*} = 1.96$. Уменьшение плотности кристалла до $\rho = 0.825$ приводит к уменьшению размера критического зародыша и поверхностной свободной энергии: $R_* = 0.20$, $\gamma_{e*} = 1.14$. Поверхностная свободная энергия на плоской межфазной границе кристалл–газ при данной температуре равна $\gamma_{e\infty} = 2.75$ [16].

Результаты МД-моделирования позволяют оценить эффективный радиус полости, с которого начинается ее необратимый рост. При температуре $T = 0.4$ и плотностях $\rho = 0.825$ и 0.845 это 0.24 и 0.52 соответственно. КТЗ дает для этих плотностей значения $R_* = 0.48$, $R_* = 0.95$. Таким образом, можно предположить, что вблизи температуры конечной точки линии плавления расхождения в частоте зародышеобразования между данными МД-моделирования и КТЗ связаны с размерной зависимостью поверхностной свободной энергии на границе кристалл–полость.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Молекулярно-динамическое моделирование ЛД ГЦК-кристалла показало, что при $T < T_K$ первым обращается в нуль модуль всестороннего сжатия K, при этом потери восстановительной реакции ГЦК-кристаллом на длинноволновые возмущения плотности не наблюдается. Кристалл сохраняет устойчивость и в состояниях с $K \le 0$. Это отличает поведение ГЦК-кристалла при $T < T_K$ от $T > T_K$, где состояния, в которых происходит зануление какого-либо из модулей упругости, не достигаются, а экстраполяция модулей к их нулевым значениям свидетельствует, что первым обращается в нуль модуль тетрагонального сдвига μ' [14].

Устойчивость кристалла относительно бесконечно малых неоднородных деформаций определяет модуль одностороннего сжатия $\tilde{K}$. Экстраполяция модуля $\tilde{K}$ к нулевому значению свидетельствует, что потеря устойчивости ГЦК-кристаллом связана с направлением [100].

При $T < T_K$ в состояниях с $K \le 0$ фазовый распад носит активационный характер и начинается с появления первого жизнеспособного зародыша. Времена ожидания жизнеспособных зародышей распределены по закону Пуассона. Это характерно как для распада кристаллической фазы при $T > T_K$, когда образуются зародыши жидкой фазы [14], так и для других метастабильных фаз [1, 2].

Сопоставление результатов МД-расчетов частоты зародышеобразования с данными КТЗ показывает, что при удовлетворительном согласии в барической зависимости J имеют место систематические расхождения в абсолютных значениях частоты, которые достигают шести–семи порядков. Рассчитанные в соответствии с КТЗ по МД-данным о частоте зародышеобразования значения поверхностной свободной энергии критического зародыша меньше, чем на плоской межфазной границе. Меньшее значение имеет при этом и радиус критического зародыша. Для $T = 0.4$ расхождения в значениях $\gamma_{e\infty}$ и γ_{e*} составляют 30–60%. Радиусы критических зародышей здесь – 0.20–0.68, что хорошо согласуется с прямыми оценками размеров критических полостей в процессе МД-моделирования.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 18-19-00276).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Скрипов В.П.* Метастабильная жидкость. М.: Наука, 1972. 312 с.
2. *Baidakov V.G., Protsenko S.P.* Singular Point of a System of Lennard-Jones Particles at Negative Pressures // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 95. № 1. 015701.
3. *Байдаков В.Г., Проценко С.П.* Метастабильные продолжения линий фазовых равновесий и особые точки простого вещества // ЖЭТФ. 2006. Т. 130. № 6. С. 1014.
4. *Ginzburg V.L., Levanyuk A.P.* On Light Scattering near Phase-transition Points in the Solid State // Phys. Lett. A. 1974. V. 47. № 4. P. 345.
5. *Wang J., Li Ju., Yip S., Phillot S., Wolf D.* Mechanical Instabilities of Homogeneous Crystals // Phys. Rev. B. 1995. V. 52. № 17. P. 12627.
6. *Born M.* Thermodynamics of Crystals and Melting // J. Chem. Phys. 1939. V. 7. № 8. P. 591.
7. *Журков С.Н., Нарзуллаев Б.Н.* Временная зависимость прочности твердых тел // ЖТФ. 1953. Т. 23. № 10. С. 1677.
8. *Зельдович Я.Б.* Теория образования новой фазы. Кавитация // ЖЭТФ. 1942. Т. 12. № 11–12. С. 525.
9. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теория упругости. М.: Наука, 1965. 204 с.
10. *Turnbull D., Fisher J.C.* Rate of Nucleation in Condensed Systems // J. Chem. Phys. 1949. V. 17. № 1. P. 71.
11. *Plimpton S.* Fast Parallel Algorithm for Short-range Molecular Dynamics // J. Comp. Phys. 1995. V. 117. № 1. P. 1.
12. *Squire D.R., Holt A.C., Hoover W.G.* Isothermal Elastic Constants for Argon. Theory and Monte Carlo Calculations // Physica. 1969. V. 42. № 1. P. 388.
13. *Байдаков В.Г., Галашев А.Е., Скрипов В.П.* Устойчивость перегретого кристалла в молекулярно-динамической модели аргона // ФТТ. 1980. Т. 22. № 9. С. 2681.
14. *Байдаков В.Г., Типеев А.О.* Идеальная и предельная прочность твердого тела при растяжении // ТВТ. 2018. Т. 56. № 2. С. 193.
15. *Hill R.* The Elastic Behavior of a Crystalline Aggregate // Proc. Phys. Soc. A. 1952. V. 65. № 5. P. 349.
16. *Baidakov V.G., Tipeev A.O., Protsenko K.R.* Surface Free Energy and Some Other Properties of a Crystal–Vapor Interface: Molecular Dynamics Simulation of a Lennard-Jones System // Chem. Phys. Lett. 2017. V. 680. P. 10.

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР, 2021, том 59, № 1, с. 74–81

УДК 539.216:536.42

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ УСТОЙЧИВОСТИ МОНОСЛОЙНОЙ ПЛЕНКИ SnS_2, РАСПОЛОЖЕННОЙ НА ГРАФИТОВОЙ ПОДЛОЖКЕ

© 2021 г. А. Е. Галашев[1, 2, *], К. А. Иваничкина[1], А. С. Воробьёв[1]
[1]ФГБУН Институт высокотемпературной электрохимии
Уральского отделения РАН, г. Екатеринбург, Россия
[2]Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,
г. Екатеринбург, Россия
*E-mail: galashev@ihte.uran.ru

Поступила в редакцию 01.11.2019 г.
После доработки 20.12.2019 г.
Принята к публикации 24.12.2019 г.

Методом молекулярной динамики исследована термодинамическая устойчивость двумерной системы “дисульфид олова на графитовой подложке” в температурном диапазоне от 200 до 550 K. Хотя термический и механический критерии устойчивости предсказывают отсутствие разрушения этого нанокомпозита, связанного с появлением фазового перехода, при температурах $T \geq 450$ K происходит отслоение пленки от подложки. Такое структурное изменение сопровождается небольшим изменением тренда температурной зависимости изобарной теплоемкости. Спектры электронной плотности и зонная структура этой системы рассчитаны с помощью *ab initio* молекулярной динамики. Зонная структура монослоя дисульфида олова значительно трансформируется после помещения пленки на графитовую подложку. Изменения зонной структуры выражаются в значительном сужении запрещенной зоны системы “пленка SnS_2—графитовая подложка” и переходе нанокомпозита в проводящее состояние при $T \geq 450$ K. Применение рассматриваемого нанокомпозита в качестве материала анода или в электронных устройствах допустимо, если его рабочая температура не превышает 400 K.

DOI: 10.31857/S0040364420060095

ВВЕДЕНИЕ

Олово, как и кремний, способно формировать с литием интерметаллическое соединение с рекордным содержанием лития (4.4 Li на 1 атом Si). Поэтому Sn и его соединения рассматриваются как главные кандидаты для конструирования анода литий-ионной батареи. Углеродные аноды с медными токосъемниками имеют низкую емкость в расчете на общую массу всего электрода [1]. В настоящее время проводится разработка анодов на основе сульфида олова [2, 3].

SnS_2 относится к дихалькогенидам переходных металлов и имеет слоистую структуру типа “сэндвич” S—Sn—S. В пределах одной атомной плоскости между атомами олова и серы осуществляется сильная ионно-ковалентная связь, в то время как между листами SnS_2 действуют силы Ван-дер-Ваальса. Эта особенность делает возможным получение двумерного материала путем механического отслаивания. Наиболее распространенная модификация соединения относится к тригональной кристаллографической группе $P\text{-}3m1$. Температура плавления объемного SnS_2 такой модификации составляет 600°C. Была также синтезирована кубическая SnS_2-структура (с пространственной группой $Fd3m$), алмазоподобная подрешетка олова в которой остается устойчивой в диапазоне температур от –250 до 300°C [4].

Существенное снижение общей емкости батареи происходит из-за использования металлических токосъемников, которые являются наиболее тяжелыми компонентами в анодах. Значительно более легкими и перспективными представляются аноды, выполненные на основе нанокомпозитов, включающих полимеры, диоксид олова и углеродные наноструктуры [5]. Углеродные токосъемники, такие как графеновые и углеродные нанотрубки, придают электроду малый вес, превосходную электрическую проводимость и прекрасные механические свойства. Покрытие SnS—SnS_2 способно превратить пористый углерод с большой площадью поверхности в высокоэффективный анод для ионно-металлических батарей [6]. Стоимость наиболее распространенных на сегодняшний день литий-ионных батарей (ЛИБ) не может быть значительно снижена, что обусловлено малым природным содержанием лития. В то же время натриево-ионные батареи (НИБ) представляются одной из наиболее перспективных

Таблица 1. Параметры потенциала Морзе для описания взаимодействий Sn–C, S–C, C–C

Тип взаимодействия	D_e, эВ	α, нм$^{-1}$	r_e, нм
Sn–C	0.4762	15.195	0.35493
S–C	0.2629	17.018	0.34047
C–C	0.2274	15.390	0.44992

альтернатив ЛИБ, особенно для устройств крупномасштабного хранения энергии. Это связано с природным изобилием и низкой стоимостью натрия. Однако в последнее время прогресс в разработке металл-ионных батарей замедлился из-за отсутствия подходящих анодных материалов. Коммерциализации НИБ может способствовать использование обычного активированного угля, покрытого тонкой пленкой $SnS–SnS_2$, в качестве анодного материала. Стабилизация углеродного материала достигается за счет того, что только ионы натрия после десольватации могут проходить гибридное покрытие $SnS–SnS_2$ и достигать внутренней углеродной поверхности. При этом воздействие на углеродную среду оказывается избирательным и щадящим. Использование электродов из чистого дисульфида олова затруднено тем, что при литизации материал подвержен значительному разбуханию и сплавообразованию [7]. Также неэффективным оказалось использование гибридного электрода, полученного из восстановленного оксида графена и сульфида олова (rGO–SnS_2) [7]. При температуре 293 K наблюдалось снижение коэффициента диффузии ионов лития более чем на порядок уже после 100 циклов зарядки/разрядки. Однако при увеличении температуры начиная с 370 K величина коэффициента диффузии ионов Li^+ заметно возрастала вместе с увеличением электропроводности оксида графена [8]. Кроме того, появляющиеся при циклировании пластические деформации влияют на теплоемкость материала электродов. Было показано, например, что у монокристаллического кремния, подвергнутого пластической деформации при $T > 200$ K, увеличивается теплоемкость c_p (по сравнению с недеформированным образцом) [9]. Это во многом обусловлено ростом дефектности структуры. Углеродная подложка зарекомендовала себя как очень перспективный материал для поддержки ультратонких пленок кремния (силицена) в аноде ЛИБ [10, 11], а также при использовании в качестве анода этого композита, подвергнутого нейтронному трансмутационному легированию [12].

Свободностоящий монослой SnS_2 имеет запрещенную зону 1.54 эВ, которая незначительно уменьшается при осаждении на него Na [13]. Даже когда количество осажденного натрия соответствует составу Na_2SnS_2, величина запрещенной зоны (ЗЗ) составляет 1.19 эВ. Гетероструктура SnS_2–графен более приспособлена для использования в качестве анодного материала за счет увеличения механической стабильности и сокращения величины запрещенной зоны.

Применение тонкой пленки SnS_2 в электрохимических устройствах не является ее единственным предназначением. Этот материал характеризуется превосходным поглощением видимого света, отличными характеристиками n-типа и высокой чувствительностью, что предполагает использование SnS_2 в фотоэлектрических устройствах [14] и фотоприемниках [15, 16].

Нижний температурный предел функционирования электронных устройств, использующих металл-ионные батареи, не опускается ниже 250°C, а верхний не поднимается выше 550°C. Предполагается, что двумерный материал “монослойный SnS_2 на графитовой подложке” может быть использован в качестве анодного материала для металл-ионных батарей нового поколения.

Цель настоящей работы – исследовать термодинамическую устойчивость однослойной пленки SnS_2, расположенной на графитовой подложке, в температурном диапазоне $250 \le T \le 550$ K.

КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ

В данной работе исследование термической устойчивости системы “SnS_2–графитовая подложка” выполнялось методами как классической, так и первопринципной молекулярной динамики (МД).

Метод классической молекулярной динамики. Расчеты методом классической молекулярной динамики проводились с использованием программного пакета LAMMPS. Интегрирование уравнений движения атомов выполнялось на основе алгоритма Верле [17]. Временнóй шаг в компьютерном моделировании составлял 1 фс. Взаимодействие атомов в листах SnS_2 представлялось с помощью потенциала Стиллинджера–Вебера [18].

Взаимодействие атомов пленки дисульфида олова с атомами графитовой подложки описывалось потенциалом Морзе

$$\Phi(r) = D_e\left[\exp\{-2\alpha(r - r_e)\} - 2\exp\{-\alpha(r - r_e)\}\right],$$

где D_e – глубина потенциальной ямы, α – параметр жесткости, r_e – равновесная длина связи. Параметры потенциала представлены в табл. 1.

На рис. 1 представлена начальная конфигурация исследуемой системы “пленка дисульфида олова на графитовой подложке”. В процессе моделирования давление повышалось от 0 до 0.5 ГПа.

Моделирование выполнялось следующим образом. Система содержала 350 атомов S, 175 атомов Sn и 3024 атомов C. Монослойная пленка дисульфида олова образована транслированием элементарной гексагональной ячейки, размер полученного листа составлял 4.8 × 4.8 нм^2 с учетом размера атомов. До начала МД-расчетов системы “графит” и “дисульфид олова (IV)” подвергались геометрической оптимизации, выполненной с помощью программы LAMMPS. В процессе оптимизации SnS_2 длина связи Sn–S уменьшилась от 0.26 нм до 0.251 нм. Далее системы нагревались при нулевом давлении до температуры 100 K в течение 10 пс в условиях *NVE*-ансамбля. Затем пленка SnS_2 переносилась на углеродную подложку, образованную четырьмя слоями графита. Расстояние между подложкой и пленкой составляло 0.297 нм.

На следующем этапе в условиях *NPT*-ансамбля выполнялся непрерывный нагрев объединенной системы SnS_2–C от 100 до 200 K при давлении 101.3 кПа. Нагрев продолжался в течение 50 пс.

Исследовано восемь систем SnS_2–C в температурном диапазоне 200–550 K с шагом повышения температуры 50 K. При каждом значении температуры давление увеличивалось от 0.05 до 0.5 ГПа с шагом 0.05 ГПа. В процессе роста давления рассчитывались флуктуации объема системы.

Коэффициент сжимаемости при постоянной температуре можно записать как

$$\beta_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T.$$

При постоянных величинах T и P, т.е. в условиях *NPT*-ансамбля, изотермическая сжимаемость определяется следующим образом [19]:

$$\beta_T = \frac{\left\langle \delta V^2 \right\rangle_{NPT}}{k_{\rm B} T V}.$$

Здесь $\left\langle \delta V^2 \right\rangle_{NPT}$ – квадрат флуктуации объема в условиях *NPT*-ансамбля; $k_{\rm B} = 1.38 \times 10^{-23}$ Дж K^{-1} – постоянная Больцмана; T, V – средние величины температуры и объема системы.

Чтобы оценить устойчивость всей системы “SnS_2–графитовая подложка” рассмотрим ее в виде изотропного твердого тела, т.е. без учета анизотропии отдельных частей системы.

Условия термодинамической устойчивости для изотропной среды имеют вид [20]

$$(T/c_p) > 0, \quad (1/V\beta_T) > 0,$$

где изобарная теплоемкость системы c_p рассчитывается в соответствии с ее определением $c_p = (\partial H/\partial T)_p$.

Теоретическая гравиметрическая емкость электрода определялась как

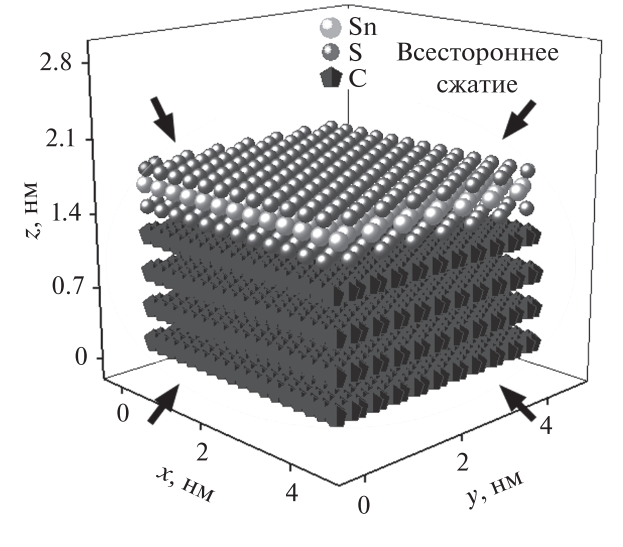


Рис. 1. Начальная конфигурация системы “дисульфид олова–графит”; стрелки – действие всестороннего давления на исследуемую систему.

$$C_{TS} = \frac{x\mathrm{F}}{M}, \quad (1)$$

где x – количество взаимодействующих электронов, F – число Фарадея, а M – молярная масса системы.

Величина C_{TS} является мерой того, сколько ионов и электронов может быть отнесено к определенной массе при обычном интеркалировании этих частиц в твердое вещество электрода.

Метод теории функционала плотности. Исследование геометрической и зонной структур системы “SnS_2–графитовая подложка” было выполнено методом теории функционала плотности (ТФП) с использованием программного пакета Siesta. Реализуемый программой Siesta метод ТФП основан на использовании адиабатического приближения Хартри–Фока, которое позволяет перейти от многоэлектронной модели к одноэлектронной. Такой трансформации способствует разделение квантовых чисел заряда и спина электрона, которое создает возможность трактовки возбуждения в форме свободного электрона [21]. В случае одиночного листа графена в принципе возможен сильный корреляционный эффект между валентными электронами соседних атомов C, приводящий к некорректности использования аппроксимации среднего поля и адиабатического приближения [22]. Однако присутствие соседствующих листов графена в графите (графит состоит из уложенных стопкой листов графена) создает усредняющий эффект, значительно ослабляя эту электронную корреляцию. В результате использование адиабатического приближения для графена оказывается приемлемым.

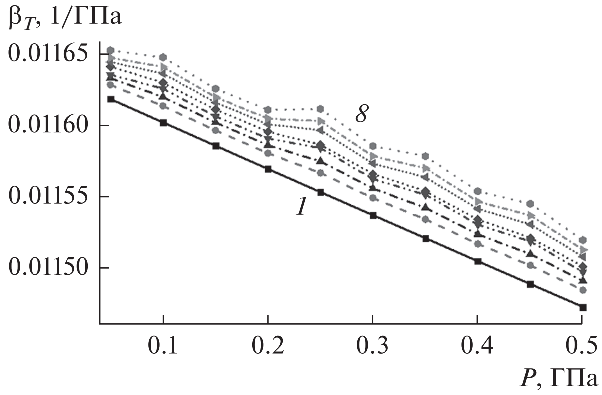


Рис. 2. Поведение коэффициента изотермической сжимаемости для системы SnS_2–C при повышении давления и различных температурах: *1* – T = 200 K, *2* – 250, *3* – 300, *4* – 350, *5* – 400, *6* – 450, *7* – 500, *8* – 550.

Модель пленки SnS_2 создавалась путем транслирования сверхъячейки 2 × 2 (расположенной в плоскости xy) в x- и y-направлениях. Эта ячейка включала 8 атомов серы и 4 атома олова. Длина вектора трансляции в направлении оси 0z равна 3 нм. Углеродная подложка задавалась 48 атомами металла, расположенными в трех слоях. В x- и y-направлениях действовали периодические граничные условия, расширяющие систему из 60 атомов. Геометрическая оптимизация (ГО) проводилась для всех рассматриваемых систем “SnS_2–подложка” с использованием локальной аппроксимации плотности (ЛАП). Динамическая релаксация атомов продолжалась до тех пор, пока изменение полной энергии системы не становилось меньше 0.001 эВ. Энергия обрезания базиса плоских волн составляла 200 Ry (1 Ry = 13.6 эВ). Зона Бриллюэна задавалась методом Монхорста–Пака [23] с использованием 10 × 10 × 1 k-точек. В ходе расчетов были получены спектры электронных состояний системы (ЭСС), включая соответствующие парциальные спектры (ПЭСС). Также определялись межатомные расстояния при различных температурах.

Исследование термической устойчивости проводилось методом *ab initio* молекулярной динамики. Заданная температура поддерживалась термостатом Нозе–Гувера [24] и изменялась в диапазоне 250–500 K с шагом 50 K. Длительность расчетов составляла 5000 временны́х шагов при шаге 1 фс.

В результате моделирования получена энергия когезии E_{coh}, определенная согласно выражению

$$E_{\text{coh}} = -\frac{E_{\text{tot}} - E_{\text{SnS}_2} - E_{\text{C}}}{n}, \qquad (2)$$

где E_{tot} – полная энергия системы “SnS_2–графитовая подложка”, E_{SnS_2} энергия листа дисульфида олова, E_C – энергия графитовой подложки, n – количество атомов в системе.

ЭСС для представленной полосы m определяются выражением

$$N_m(E) = \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \delta(E - E_m(\mathbf{k})),$$

где дисперсия зоны входит в δ-функцию в виде аргумента $E_m(\mathbf{k})$, а интеграл берется по зоне Бриллюэна. Среднее смещение атомов системы относительно конфигурации, полученной до геометрической оптимизации, определялось как

$$\Delta k = \frac{\sum_n abs((k_1 - k_0) - \bar{k})}{n}.$$

Здесь k_1 – координата x, y или z после расчета с помощью *ab initio* молекулярной динамики и геометрической оптимизации; k_0 – координата x, y или z, полученная для двумерного идеального дисульфида олова; $\bar{k}$ – среднее значение, полученное для разницы координат $k_1 - k_0$ по всем частицам, введенное, чтобы исключить параллельное смещение системы.

Все расчеты проводились на гибридном вычислителе кластерного типа “УРАН” при ИММ УрО РАН с пиковой производительностью 216 Тфлопс/с и 1864 CPU.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Поведение коэффициента изотермической сжимаемости в зависимости от воздействия внешнего всестороннего сжатия показано на рис. 2. По мере роста давления сжимаемость незначительно падает (не более чем на 2% от первоначального значения), а при повышении температуры β_T также незначительно увеличивается.

Температурная зависимость расстояния между подложкой и нижним слоем атомов серы представлена на рис. 3. Изначально расстояние между SnS_2 и подложкой составляло 0.297 нм, что точно соответствует расстоянию, полученному в работе [25]. В диапазоне температур 200–400 K происходит сближение пленки и подложки. Максимальное сближение соответствует температуре 200 K и составляет 0.292 нм. В диапазоне 450–550 K пленка SnS_2 начинает отходить от графита. Максимальное удаление (0.327 нм) наблюдается при 550 K. *Ab initio* МД-расчеты указывают на иное поведение температурной зависимости этой характеристики (рис. 3). Максимальное расхождение между результатами двух методов расчета расстояния от пленки до подложки составляет около 14%. В данном случае первопринципные расчеты менее точны, чем классические МД-расчеты, из-за малого числа частиц в системе.

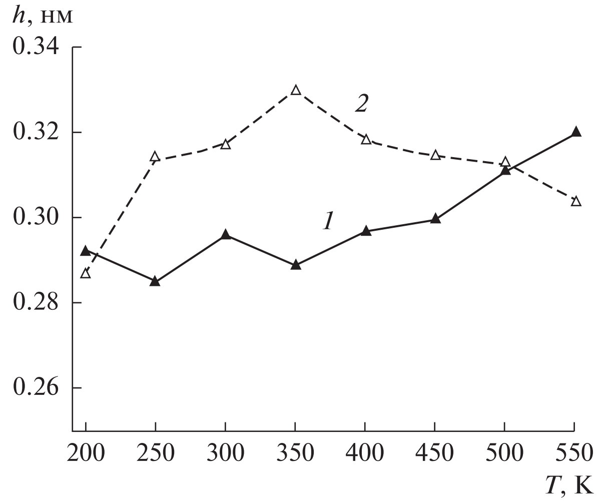


Рис. 3. Зависимости изменения расстояния между графитовой подложкой и пленкой SnS_2 от температуры при $P = 0$, полученные с применением методов классической МД (*1*) и *ab initio* МД (*2*).

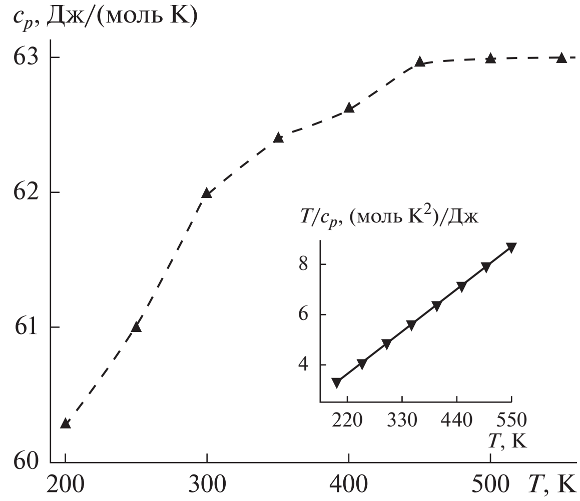


Рис. 4. Температурная зависимость изобарной теплоемкости системы SnS_2–графит; на вставке – температурная зависимость коэффициента изотермической устойчивости T/c_p.

Температурная зависимость изобарной теплоемкости и критерия термической устойчивости (T/c_p) представлена на рис. 4. Рассчитанная зависимость $c_p(T)$ согласуется с законом Дебая. Видно, что во всем диапазоне температур условие термической устойчивости ($T/c_p > 0$) выполняется. Согласно работе [26], теплоемкость c_p SnS_2 при $T = 298.15$ K равна 70.06 Дж/(моль K). Рассчитанное здесь значение c_p при близкой температуре ($T = 300$ K) составляет 61.99 Дж/(моль K). При повышении температуры c_p растет. Однако низкая теплоемкость графита приводит к тому, что теплоемкость исследуемой системы оказывается ниже, чем экспериментальная величина c_p для чистого дисульфида олова.

Зависимость критерия механической устойчивости от температуры представлена на рис. 5. При повышении температуры наблюдается общий тренд к уменьшению значения ($1/\beta_T$), однако это уменьшение в рассматриваемом температурном интервале не превышает 1%. Отметим, что даже десятикратное увеличение давления не изменяет температурного поведения изодинамического коэффициента устойчивости $1/\beta_T$. Несмотря на снижение $1/\beta_T$, с ростом температуры предел механической устойчивости ($1/\beta_T = 0$) не был достигнут даже при 550 K. Это означает, что при этой температуре не достигается нового фазового состояния. Тем не менее, как было показано выше, критические изменения в структуре твердой фазы все же происходят, и связаны они с отделением пленки SnS_2 от графитовой подложки. В [4] модуль объемного сжатия B при нулевом давлении оценивается как 72.29 ГПа. Рассчитанное здесь значение $B = 1/\beta_T$ для исследуемой системы равно 86.06 ГПа (при $P = 0$).

Для оценки гравиметрической емкости на основе ТФП-расчетов использованы следующие соотношения максимального литирования материалов, составляющих электрод: $SnLi_{4.4}$ [27], Li_2S, C_6Li. Данные соотношения показывают количество взаимодействующих электронов для каждого вида атомов в рассматриваемой системе. Их использование в расчетной формуле (1) приводит к значению гравиметрической удельной емкости 624.9 мА ч/г. Данное значение выше значения

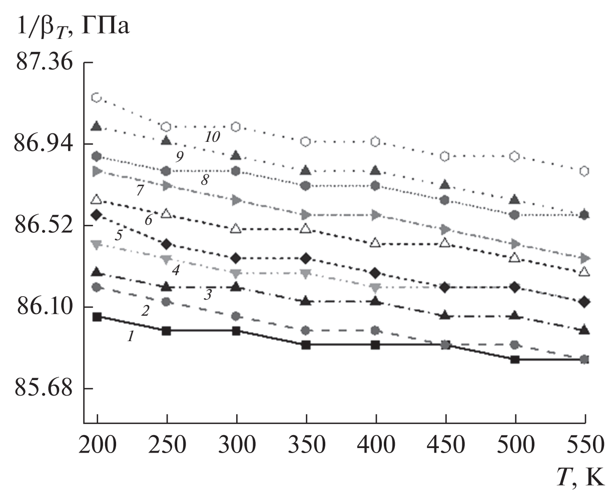


Рис. 5. Температурная зависимость критерия механической устойчивости ($1/\beta_T$) системы SnS_2–графит: *1* – $P = 0.05$ ГПа, *2* – 0.1, *3* – 0.15, *4* – 0.2, *5* – 0.25, *6* – 0.3, *7* – 0.35, *8* – 0.4, *9* – 0.45, *10* – 0.5.

Таблица 2. Характеристики системы “SnS_2–углеродная подложка”, полученные по окончании геометрической оптимизации

Sn–S, нм	S–C$_{(int)}$, нм	S–C$_{(bond)}$, нм	C–C, нм	E_{coh}, эВ
0.256	0.287	0.331	0.136	–0.062

Примечание. Sn–S – средняя длина связи между атомами олова и серы, S–C$_{(int)}$ – среднее расстояние по оси z между атомами серы и углерода, S–C$_{(bond)}$ – средняя длина связи между атомами серы и углерода, C–C – средние длины связи, полученные между атомами углерода.

Таблица 3. Температурная зависимость физических свойств системы “SnS_2–графитовая подложка”

	ГО	250 K	300 K	350 K	400 K	450 K	500 K	550 K
Sn–S$_{(top)}$, нм	0.144	0.140	0.144	0.148	0.146	0.1490	0.1471	0.1453
Sn–S$_{(bot)}$, нм	0.148	0.145	0.149	0.148	0.151	0.1501	0.1535	0.1523
ЗЗ, эВ	0.191	0.062	0.052	0.040	0.036	Проводник	Проводник	Проводник
Δx, 10^{-3} нм	1.6	1.4	1.6	1.5	1.6	7.5	7.1	8.7
Δy, 10^{-3} нм	1.9	2.2	1.8	1.8	1.8	7.2	7.5	7.8
Δz, 10^{-3} нм	0.8	1.2	0.9	0.9	0.9	9.6	10.7	14.4

Примечание. Sn–S$_{(top)}$ – среднее расстояние по оси z между атомами олова и верхними атомами серы; Sn–S$_{(bot)}$ – среднее расстояние по оси z между атомами олова и нижними атомами серы; Δx, Δy, Δz, – средние смещения атомов SnS_2 по направлениям x, y, z соответственно, рассчитанные по (2).

372 мА ч/г, полученного для графита [28], но меньше гравиметрической емкости 862 мА ч/г, полученной для квантовой точки SnS_2 [29].

Геометрическая оптимизация не дает “траектории” с каким-либо физическим смыслом. Процедура оптимизации связана с минимизацией сил, действующих на каждый атом, принадлежащий рассматриваемой группе. Различные алгоритмы оптимизации могут приводить к одному и тому же результату получения структуры с минимальной энергией. Однако пути, приводящие к этому результату, могут быть разными. В данной работе выполнена геометрическая оптимизация системы с использованием метода ЛАП. В табл. 2 представлены характеристики системы после геометрической оптимизации. Все полученные геометрические характеристики и энергия когезии согласуются с соответствующими данными работ [30, 31] в пределах 15%.

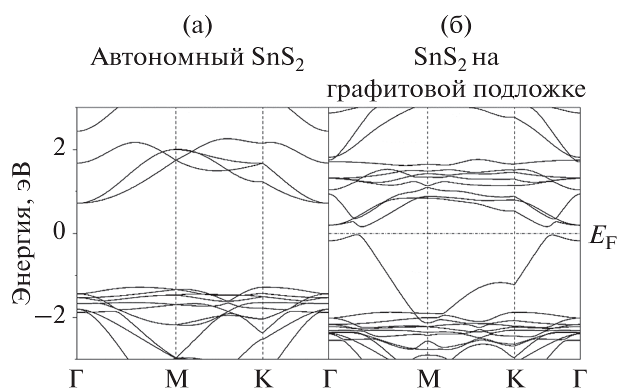


Рис. 6. Зонные структуры автономного монослоя дисульфида олова (а) и дисульфида олова на графитовой подложке (б).

Ширина запрещенной зоны (2.14 эВ), рассчитанная авторами для совершенного автономного монослоя дисульфида олова, на 28% выше, чем полученная в работе [13], и на 5% ниже, чем соответствующая величина (2.25 эВ), определенная в [32]. Изменение зонной структуры монослоя SnS_2 при его размещении на углеродной подложке демонстрирует рис. 6. Особые точки в k-пространстве первой зоны Бриллюэна отмечены буквами: Г – центр зоны; К – середина ребра, по которому происходит касание двух смежных шестиугольных граней; М – центр прямоугольной грани. Видно, что в присутствии графитовой подложки ширина запрещенной зоны сузилась до 0.191 эВ.

Рассчитанные методом *ab initio* молекулярной динамики геометрические и энергетические характеристики системы “SnS_2–графитовая подложка” представлены в табл. 3 для различных температур. С ростом температуры исследуемая система приобретает проводниковые свойства. В частности, ширина запрещенной зоны сокращается с 0.062 до 0.036 эВ при увеличении температуры от 250 до 400 K. При температуре 450 K и выше запрещенная зона исчезает.

Для температурного диапазона от 250 до 400 K при наличии подложки средние смещения атомов в листе SnS_2 в направлениях x, y, z не превы-

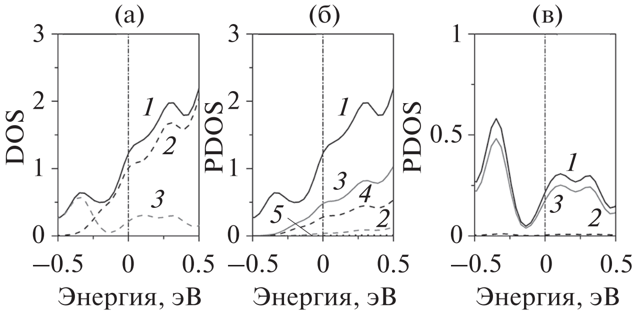


Рис. 7. ЭСС и ПЭСС для системы “SnS_2 на графитовой подложке” (а) и отдельно ее подсистем SnS_2 (б) и графита (в), полученные с помощью *ab initio* молекулярной динамики при температуре 550 K: (а) *1* – полный, *2* – SnS_2, *3* – C; (б) *1* – SnS_2, *2* – 3*s*-электрон S, *3* – 3*p*, *4* – 5*s*-электрон Sn, *5* – 5*p*; (в) *1* – C, *2* – 2*s*-электрон C, *3* – 2*p*; штрихпунктирная вертикаль – E_F.

шают 0.0025 нм. Повышение температуры от 450 до 550 K приводит к увеличению смещений до 0.01 и 0.015 нм в направлениях *x*, *y* и *z* соответственно.

На рис. 7 представлены спектры электронных состояний (в том числе парциальные), полученные для системы “SnS_2–графитовая подложка” при 550 K. Как видно из ПЭСС-спектров, проводимость в данной системе появляется вследствие взаимодействия *p*-электронов углерода и олова с *s*-электронами серы. Ширина запрещенной зоны зависит от расстояния между нижним подслоем, образованным атомами серы, и поверхностью графитовой подложки (табл. 3). При увеличении температуры от 250 до 550 K происходят сближение (от 0.3141 до 0.3036 нм) нижних атомов серы в листе SnS_2 с атомами углерода и одновременное сужение запрещенной зоны. Это приводит к увеличению (от 0.1454 до 0.1523 нм) среднего расстояния между атомами олова и атомами серы нижнего подслоя SnS_2.

Гетероструктура SnS_2–графит более приспособлена для использования в качестве анодного материала, чем однослойная пленка SnS_2, за счет увеличения механической стабильности, сокращения величины запрещенной зоны, проявления высокой термической устойчивости и поверхностной активности.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В компьютерном эксперименте исследована термическая и механическая устойчивость двумерного материала “SnS_2 на графитовой подложке”. Определено поведение изотермической сжимаемости и изобарной теплоемкости данного нанокомпозита в температурном диапазоне от 200 до 550 K. Показано появление проводниковых свойств пленки SnS_2 на углеродной подложке при температуре выше 450 K. Графитовая подложка способствует упрочнению структуры SnS_2 и снижению теплоемкости кристалла. Уменьшение удельного веса материала и теплоемкости c_p благодаря использованию углеродной подложки имеет важное значение при конструировании анода, поскольку снижение веса приводит к увеличению удельной емкости, а понижение теплоемкости ведет к уменьшению разогрева системы и, как следствие, улучшению эксплуатационных характеристик батареи. Рассмотренный двумерный материал может эксплуатироваться вплоть до рабочих температур ~400 K.

Таким образом, исследованный нанокомпозит может служить новым материалом анода, обеспечивающим высокую общую плотность энергии и мощности, длительный срок службы, хорошую гибкость и низкую стоимость литий-ионного аккумулятора.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президиума УрО РАН № 18-10-3-31.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Liu J., Tang K., Song K., Aken P.A., Yu Y., Maier J.* Electrospun $Na_3V_2(PO_4)_3$/C Nanofibers as Stable Cathode Materials for Sodium-ion Batteries // Nanoscale. 2014. V. 6. P. 5081.
2. *Saravanan K., Mason C.W., Rudola A., Wong K.H., Balaya P.* The First Report on Excellent Cycling Stability and Superior Rate Capability of $Na_3V_2(PO_4)_3$ for Sodium Ion Batteries // Adv. Energy Mater. 2013. V. 3. P. 444.
3. *Berthelot R., Carlier D., Delmas C.* Electrochemical Investigation of the P_2–Na_xCoO_2 Phase Diagram // Nat. Mater. 2011. V. 10. P. 74.
4. *Bakhshayeshi A., Mendi R.T., Sarmazden M.M.* Effect of Hydrostatic Pressure on the Structural, Electronic, and Optical Properties of SnS_2 with a Cubic Structure: The DFT Approach // J. Electron. Mater. 2018. V. 47. P. 1472.
5. *Liu J., Wen Y., van Aken P.A., Maier J., Yu Y.* In Situ Reduction and Coating of SnS_2 Nanobelts for Free-standing SnS@Polypyrrole-nanobelt/carbon-nanotube Paper Electrodes with Superior Li-ion Storage // J. Mater. Chem. A. 2015. V. 3. Iss. 10. P. 5259.
6. *Zhang S.-W., Lv W., Qiu D., Cao T., Zhang J., Lin Q., Chen X., He Y.-B., Kang F., Yang Q.-H.* An Ion-conducting SnS–SnS_2 Hybrid Coating for Commercial Activated Carbons Enabling Their Use as High Performance Anodes for Sodium-ion Batteries // J. Mater. Chem. A. 2019. V. 7. P. 10761.
7. *Modarres M., Lim J.H.-W., George C., Volder M.D.* Evolution of Reduced Graphene Oxide–SnS_2 Hybrid Nanoparticle Electrodes in Li-ion Batteries // J. Phys. Chem. C. 2017. V. 121. Iss. 17. P. 13018.
8. *Бабаев А.А., Зобов М.Е., Корнилов Д.Ю., Ткачев С.В., Теруков Е.И., Левицкий В.С.* Температурная зависимость электрического сопротивления оксида графена // ТВТ. 2019. Т. 57. № 2. С. 221.

9. *Исмаилов Ш.М., Омаров З.М., Велиханов А.Р.* Влияние пластической деформации на теплоемкость кремния // ТВТ. 2019. Т. 57. № 1. С. 140.
10. *Галашев А.Е., Рахманова О.Р., Иваничкина К.А.* Компьютерное исследование применения графеновой и графитовой поддержки для стабилизации силицена // Журн. структ. химии. 2018. Т. 59. № 4. С. 914.
11. *Галашев А.Е., Иваничкина К.А.* Компьютерное моделирование структуры и механических свойств слоев силицена на графите при движении иона лития // ФТТ. 2019. Т. 61. № 2. С. 365.
12. *Galashev A., Ivanichkina K., Katin K., Maslov M.* Computational Study of Lithium Intercalation in Silicene Channels on a Carbon Substrate after Nuclear Transmutation Doping // Computation. 2019. V. 7. P. 60.
13. *Samad A., Noor-A-Alam M., Shin Y.-H.* First Principle Study of a SnS_2/Graphene Heterostructure: a Promising Anode Material for Rechargeable Na Ion Batteries // J. Mater. Chem. A. 2016. V. 4. P. 14316.
14. *Tan F.R., Qu S.C., Wu J., Liu K., Zhou S.Y., Wang Z.G.* Preparation of SnS_2 Colloidal Quantum Dots and Their Application in Organic/Inorganic Hybrid Solar Cells // Nanoscale Res. Lett. 2011. V. 6. P. 1.
15. *Su G., Hadjiev V.G., Loya P.E., Zhang J., Lei S., Maharjan S., Dong P., Ajayan P.M., Lou J., Peng H.* Chemical Vapor Deposition of Thin Crystals of Layered Semiconductor SnS_2 for Fast Photodetection Application // Nano Lett. 2015. V. 15. P. 506.
16. *Zhou X., Zhang Q., Gan L., Li H., Zhai T.* Large-size Growth of Ultrathin SnS_2 Nanoflakes and High Performance for Phototransistors // Adv. Funct. Mater. 2016. V. 26. P. 4405.
17. *Verlet L.* Computer “Experiments” on Classical Fluids. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules // Phys. Rev. 1967. V. 159. P. 98.
18. *Jin-Wu J.* Parameterization of Stillinger-Weber Potential for Two-Dimensional Atomic Crystals. London: Intech Open, 2017. P. 451.
19. *Shwabl F.* Statistical Mechanics. Berlin: Springer, 2006. P. 587.
20. *Семенченко В.К.* Избранные главы теоретической физики. М.: Просвещение, 1966. 396 с.
21. *Лафлин Р.Б.* Дробное квантование // УФН. 2000. Т. 170. № 3. С. 292.
22. *Шека Е.Ф., Попова Н.А., Попов В.А.* Физика и химия графена. Эмерджентность, магнетизм, механофизика и механохимия // УФН. 2018. Т. 188. № 7. С. 720.
23. *Monkhorst H.J., Pack J.D.* Special Points for Brillouin-zone Integrations // Phys. Rev. B. 1976. V. 13. P. 5188.
24. *Nose S.* A Molecular Dynamics Method for Simulations in the Canonical Ensemble // Mol. Phys. 1984. V. 52. P. 255.
25. *Chauhan H., Singh M.K., Kumar P., Hashmi S.A., Deka S.* Development of SnS_2/RGO nanosheet Composite for Cost-effective Aqueous Hybrid Supercapacitors // Nanotechnology. 2016. V. 2. P. 025401.
26. *Shafique A., Samad A., Shin Y.-H.* Ultra-low Lattice Thermal Conductivity and High Carrier Mobility of Monolayer SnS_2 and $SnSe_2$: a First Principles Study // Phys. Chem. Chem. Phys. 2017. V. 19. P. 20677.
27. *Vaughey J.T., O’Hara J., Thackeray M.M.* Intermetallic Insertion Electrodes with a Zinc Blende-type Structure for Li Batteries: A Study of Li_xInSb $(0 \le x \le 3)$ // Electrochem. Solid State Lett. 2000. V. 3. Iss. 1. P. 13.
28. *Tritsaris G.A., Kaxiras E., Meng S., Wang E.* Adsorption and Diffusion of Lithium on Layered Silicon for Li-ion Storage // Nano Lett. 2013. V. 13. P. 2258.
29. *Zhang Y., Guo Y., Wang Y., Peng T., Lu Y., Luo R., Wang Y., Liu X., Kim J.-K., Luo Y.* Rational Design of 3D Honeycomb-like SnS_2 Quantum Dots/*r*GO Composites as High-performance Anode Materials for Lithium/Sodium-ion Batteries // Nanoscale Res. Lett. 2018. V. 13. P. 389.
30. *Gonzalez J.M., Oleynik I.* Layer-dependent Properties of SnS_2 and $SnSe_2$ Two-dimensional Materials // Phys. Rev. B. 2016. V. 94. P. 125443.
31. *Schlüter M., Cohen M.L.* Valence-band Density of States and Chemical Bonding for Several Non-transition-metal Layer Compounds: $SnSe_2$, PbI_2, BiI_3, and GaSe // Phys. Rev. B. 1976. V. 14. P. 424.
32. *Burton L.A., Whittles T.J., Hesp D., Linhart W.M., Skelton J.M., Hou B., Webster R.F., O’Dowd G., Reece C., Cherns D., Fermin D.J., Veal T.D., Dhanak V.R., Walsh A.* Electronic and Optical Properties of Single Crystal SnS_2: an Earth-abundant Disulfide Photocatalyst // J. Mater. Chem. A. 2016. V. 4. P. 1312.

УДК 544.344.4+543.572.3

ТЕПЛОАККУМУЛИРУЮЩАЯ СМЕСЬ ИЗ ГАЛОГЕНИДОВ И ХРОМАТОВ НАТРИЯ

© 2021 г. Н. Н. Вердиев[1, *], И. К. Гаркушин[2], З. Н. Вердиева[1], А. В. Бурчаков[2], И. М. Кондратюк[2], Е. М. Егорова[2]

[1]Институт проблем геотермии и возобновляемой энергетики – филиал Объединенного института высоких температур РАН, г. Махачкала, Россия

[2]Самарский государственный технический университет, г. Самара, Россия

**E-mail: verdiev55@mail.ru*

Поступила в редакцию 18.12.2019 г.
После доработки 20.05.2020 г.
Принята к публикации 18.06.2020 г.

Дифференциальным термическим, дифференциальным сканирующим калориметрическим методами физико-химического анализа исследована трехкомпонентная система из хлоридов, бромидов и хроматов натрия. Установлено соотношение компонентов в нонвариантном составе, который кристаллизуется при 555°C с удельной энтальпией плавления 92.9 Дж/г. Отмечено, что в твердой фазе присутствует полиморфное превращение Na_2CrO_4 при 423°C с удельной энтальпией 42.6 Дж/г. Разработанный состав может быть использован в качестве рабочего тела в устройствах, аккумулирующих тепловую энергию в интервале температур от 300 до 600°C. Построена 3D-модель фазового комплекса системы $Na^+\|Cl^-$, Br^-, CrO_4^{2-}, и выявлены моно- и нонвариантные фазовые реакции. Пространственная модель системы позволяет анализировать фазовый комплекс системы, строить произвольно выбранные изотермические и политермические сечения.

DOI: 10.31857/S0040364421010166

ВВЕДЕНИЕ

Нонвариантные составы многокомпонентных солевых систем имеют широкий спектр применений. Они используются в качестве теплоаккумулирующих материалов, высокотемпературных теплоносителей, расплавленных катализаторов, электролитов многоцелевого назначения, в производстве современного стрелкового вооружения, ядерной энергетике и т.д. [1–9]. Существующая в настоящее время информация по солевым системам недостаточна, что связано с длительностью и трудоемкостью проведения экспериментальных исследований. В связи с этим расширение спектра солевых составов является актуальной задачей, необходимой для обеспечения высокой конкурентоспособности и технологичности современных изделий. Исследования предприняты с целью разработки солевых смесей с практически значимыми свойствами.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Эксперимент по выявлению температуры плавления и состава нонвариантной точки планировался в соответствии с общими положениями проекционно-термографического метода [10]. Схема кристаллизующихся фаз систем $Na^+\|Cl^-$, Br^-, CrO_4^{2-} сформирована в соответствии с алгоритмами [11, 12]. В исследованиях использованы предварительно обезвоженные реактивы следующих квалификаций: NaCl – ос. ч., NaBr – ч, Na_2CrO_4 – ч. д. а., с содержанием основного компонента NaCl более 99%, NaBr – не менее 98%, а Na_2CrO_4 – более 98%. Температуры плавления компонентов соответствовали справочным данным [13, 14]. В качестве индифферентного вещества использован оксид алюминия (Al_2O_3) квалификации ч. д. а. Исследования проводились дифференциальным термическим (ДТА) и дифференциальным сканирующим калориметрическим (ДСК) методами физико-химического анализа [15–17]. ДТА и ДСК проведены на установке синхронного термического анализа STA 449 F3 Phoenix фирмы Netzsch, предназначенной для работы в интервале температур от комнатной до 1500°C в инертной среде (аргон). Скорость нагревания и охлаждения образцов составляла 10°C/мин. Точность измерения температур – ±1.5°C, энтальпии фазовых переходов – ±3%. Масса навесок составила 0.1000–0.2000 г для ДТА и 0.0010–0.0015 для ДСК. Составы выражены в эквивалентных процентах, температуры – в градусах Цельсия.

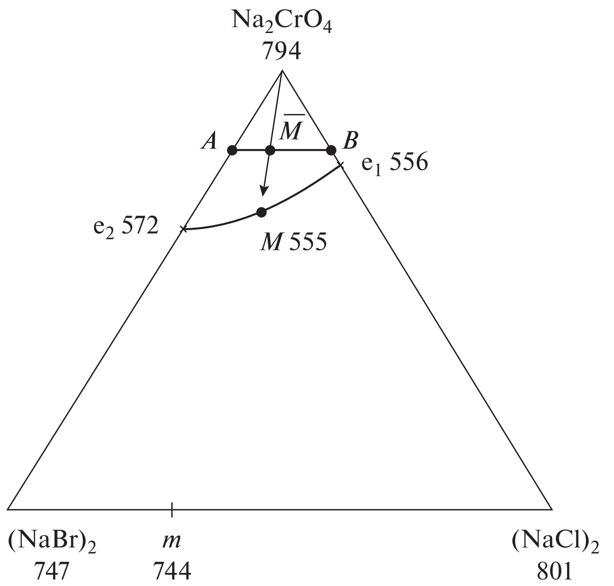


Рис. 1. Политермические сечения: *AB*; $Na_2CrO_4 \to \bar{M} \to M$ системы $Na^+\|Cl^-, Br^-, CrO_4^{2-}$.

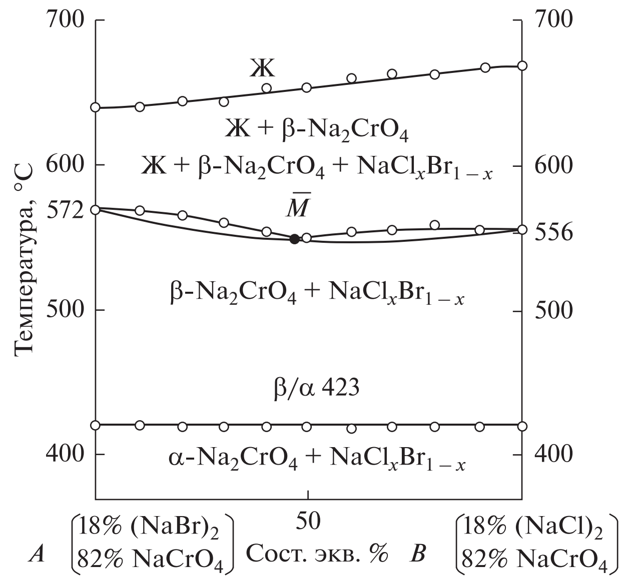


Рис. 2. *T*–*x*-диаграмма разреза *AB* системы $Na^+\|Cl^-, Br^-, CrO_4^{2-}$.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В огранение системы $Na^+\|Cl^-, Br^-, CrO_4^{2-}$ входят три двухкомпонентные системы: NaCl–NaBr [18], непрерывный ряд твердых растворов с минимумом при 744°C и 30 экв. % NaCl; NaBr–Na_2CrO_4 [19], эвтектика при 572°C и 35 экв. % NaBr, твердые фазы – NaBr, Na_2CrO_4; NaBr–Na_2CrO_4 [20], эвтектика при 556°C и 30 экв. % NaCl, твердые фазы – NaCl, Na_2CrO_4, полиморфное превращение Na_2CrO_4 при 423°C (рис. 1).

С учетом того, что две системы огранения эвтектические и одна с твердыми растворами, для подтверждения устойчивости или распада твердых растворов экспериментально с помощью ДТА исследован одномерный политермический разрез *AB*, где *A* – 18% NaCl + 82% Na_2CrO_4, *B* – 18% NaBr + 82% Na_2CrO_4 (рис. 1). Разрез *AB* выбран в поле кристаллизации компонента без твердых растворов, что значительно упрощает интерпретацию экспериментальных данных.

На рис. 2 представлена *T*–*x*-диаграмма разреза *AB*. На кривых ДТА охлаждения образцов, соответствующих разрезу *AB*, отмечены термоэффекты первичной кристаллизации β-Na_2CrO_4, совместной кристаллизации β-Na_2CrO_4 с твердыми растворами на основе хлорида и бромида натрия, а также полиморфного перехода Na_2CrO_4 при 423°C.

Об устойчивости твердых растворов $NaCl_xBr_{1-x}$ в исследуемой системе свидетельствует отсутствие на кривой ДТА эффектов совместной кристаллизации трех исходных компонентов (рис. 2). Исследованием *T*–*x*-диаграммы разреза *AB* определено направление на состав с минимальной температурой кристаллизации системы $Na^+\|Cl^-, Br^-, CrO_4^{2-}$. Исследованием разреза $Na_2CrO_4 \to \bar{M} \to M$, проведенного из полюса кристаллизации Na_2CrO_4 через точку $\bar{M}$, выявлен состав минимума *M*, содержащий NaCl – 12.5 экв. %, NaBr – 19.5, Na_2CrO_4 – 68, температура плавления – 555°C, энтальпия плавления, выявленная ДСК в результате проведения трех измерений, равна 92.9 Дж/г.

Исследованные ранее системы [21–23] с участием галогенидов, молибдатов, вольфраматов, карбонатов *s*1-элементов предложено использовать в качестве теплоаккумулирующих материалов. Эвтектические смеси этих систем содержат ингредиенты Li_2SO_4, Na_2MoO_4, Na_2WO_4, Na_2SO_4, K_2MoO_4, K_2WO_4 с полиморфными превращениями, а их эффекты не учтены. Разработка теплоаккумулирующих составов с участием солей с полиморфными превращениями позволит аккумулировать тепловую энергию и в твердой, и в жидкой фазах.

Результаты экспериментальных исследований и информация по элементам огранения использованы для выявления нон- и моновариантных фазовых реакций (таблица) и построения пространственной модели фазового комплекса системы $Na^+\|Cl^-, Br^-, CrO_4^{-2}$ (рис. 3) в программе КОМПАС-3D [24].

Фазовые реакции для элементов ликвидуса системы $Na^+\|Cl^-$, Br^-, CrO_4^{2-}

Элемент диаграммы	Равновесное состояние	Фазовая реакция
Поверхности:		
Na_2CrO_4-e_1–M-e_2–Na_2CrO_4	Дивариантное	Жидкость ⇄ ß-Na_2CrO_4
NaBr-e_2–M-e_1–NaCl–m–NaBr	Дивариантное	Жидкость ⇄ $NaCl_xBr_{1-x}$
Линии:		
e_1–M	Моновариантное	Жидкость ⇄ ß-Na_2CrO_4 + $NaCl_xBr_{1-x}$
e_2–M	Моновариантное	Жидкость ⇄ ß-Na_2CrO_4 + $NaCl_xBr_{1-x}$
Точка минимума M	Нонвариантное	Жидкость ⇄ ß-Na_2CrO_4 + $NaCl_xBr_{1-x}$

3D-модель отражает весь фазовый комплекс системы целиком в концентрационно-температурных координатах так же полно, как и плоские T–x-диаграммы двухкомпонентных систем, кроме этого, позволяет прогнозировать изотермические и политермические сечения системы, выявлять качественный и количественный фазовый состав для любой заданной фигуративной точки (по составу и температуре фазового равновесия) в условиях фазового равновесия.

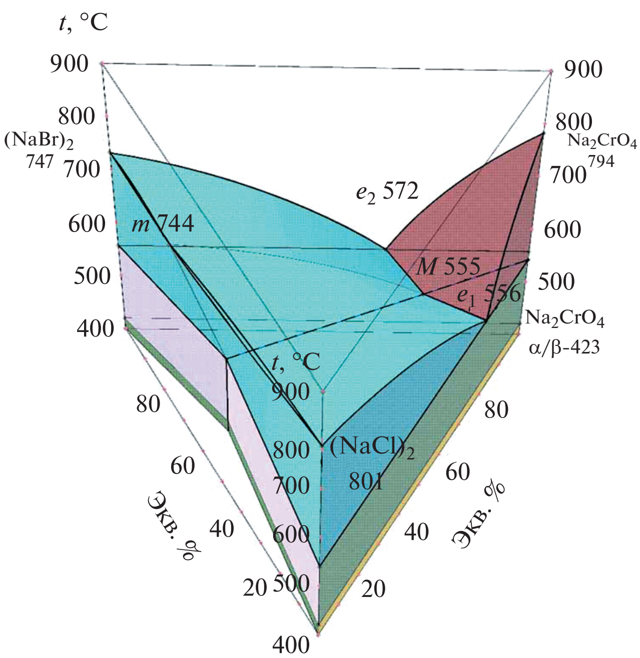


Рис. 3. Изображение трехмерной модели T–x–y-фазовой диаграммы системы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследованием ДТА серии образцов, расположенных на двух политермических сечениях, получена информация о фазовых превращениях в системе $Na^+\|Cl^-$, Br^-, CrO_4^{2-}. С помощью ДСК установлено, что выявленный состав обладает повышенной способностью к аккумулированию тепловой энергии за счет полиморфизма хромата натрия и составляет суммарно 135.5 Дж/г, таким образом, теплота фазового превращения в твердой фазе повышает более чем на 30% способность запасать и высвобождать тепловую энергию.

Выявленные моно- и нонвариантные фазовые реакции, 3D-модель фазового комплекса позволяют рассчитывать составы равновесных фаз, выбирать политермические, изотермические сечения и изотермы поверхности ликвидуса системы $Na^+\|Cl^-$, Br^-, CrO_4^{2-} в заданном температурном интервале. Компьютерная 3D-модель является эффективным подспорьем при прогнозировании фазового комплекса, теоретического и экспериментального исследования фазовых равновесных состояний многокомпонентных систем.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Вердиева З.Н., Алхасов А.Б., Вердиев Н.Н., Рабаданов Г.А., Искендеров Э.Г., Арбуханова П.А.* Фазовые равновесия в системе $(LiF)_2$–Li_2CO_3–Li_2SO_4 // Изв. вузов. Химия и хим. технология. 2019. Т. 62. № 1. С. 20.
2. *Козырева М.С.* Физико-химический анализ системы Li, Na, K, Cs‖F, Cl. Автореф. дис. ... канд. хим. наук. Саратов: Сарат. нац. иссл. гос. ун-т им. Н.Г. Чернышевского, 2018. 22 с.
3. *Колесников И.М.* Катализ и производство катализаторов. М.: Техника, 2004. 400 с.

4. *Степанов В.П.* Плотность и адиабатическая сжимаемость смесей LiF + KBr в двухфазной области // ТВТ. 2019. Т. 57. № 3. С. 371.
5. *Трифонов К.И., Александров И.А., Ларионов А.С., Трифонов И.И.* Солевые расплавы в технологии производства стрелково-пушечного вооружения // Оборонная техника. 2015. № 1–2. С. 90.
6. *Игнатьев В.В., Фейнберг О.С., Загнитько А.В., Мерзляков А.В., Суренков А.И., Панов А.В., Субботин В.Г., Афоничкин В.К., Хохлов В.А., Кормилицын М.В.* Жидкосолевые реакторы: новые возможности, проблемы и решения // Атомная энергия. 2012. Т. 112. № 3. С. 135.
7. *Дементьев Б.А.* Кинетика и регулирование ядерных реакторов. М.: Энергоатомиздат, 1986. 272 с.
8. *Бабаев Б.Д.* Высокотемпературные фазопереходные теплоаккумулирующие материалы на основе системы Li, Na, Ca, Ba||F, MoO_4 и их свойства // ТВТ. 2014. Т. 52. № 4. С. 568.
9. *Zhou D., Eames P.* Thermal Characterisation of Binary Sodium/Lithium Nitrate Salts for Latent Heat Storage at Medium Temperatures // Sol. Energy Mater. Sol. Cells. 2016. V. 157. P. 1019.
10. *Космынин А.С., Трунин А.С.* Оптимизация экспериментального исследования гетерогенных многокомпонентных систем. Самара: Сам. ГТУ, 2007. Т. 14. 160 с.
11. *Вердиева З.Н., Бурчаков А.В., Вердиев Н.Н., Алхасов А.Б., Магомедбеков У.Г.* Моделирование фазовых реакций в многокомпонентных системах // Вестн. ТвГУ. Сер. Химия. 2019. № 3(37). С. 31.
12. *Бурчаков А.В., Егорова Е.М., Кондратюк И.М., Мощенский Ю.В.* Фазовые равновесия в системе LiF–KI–KF–K_2CrO_4 // Журн. неорган. химии. 2018. Т. 63. № 7. С. 909.
13. База данных. Термические константы веществ. Ин-т теплофизики экстремальных состояний РАН Объединенного ин-та высоких температур РАН. Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова. http://www.chem.msu.ru/cgi-bin/tkv.pl. show=welcome.html
14. *Быковская А.С., Светлов Д.В.* Химические реактивы и высокочистые химические вещества: каталог. 4-е изд., перераб. М.: Росхимреактив, 2005. 576 с.
15. *Уэндландт У.* Термические методы анализа. Пер. с англ. / Под ред. Степанова В.А., Берштейна В.А. М.: Мир, 1978. 526 с.
16. *Егунов В.П.* Введение в термический анализ. Самара: СамВен, 1996. 270 с.
17. *Гаркушин И.К., Кондратюк И.М., Егорцев Г.Е., Истомова М.А.* Теоретические и экспериментальные методы исследования многокомпонентных систем. Самара: Сам. ГТУ, 2012. 125 с.
18. *Посыпайко В.И., Алексеева Е.А., Васина Н.А.* Диаграммы плавкости солевых систем. Ч. III. Двойные системы с общим катионом. М.: Металлургия, 1979. 204 с.
19. *Воскресенская Н.К., Евсеева Н.Н., Беруль С.И., Верещетина И.П.* Справочник по плавкости систем из безводных неорганических солей. Двойные системы. Т. 1. М.–Л.: Изд-во АН СССР, 1961. 845 с.
20. *Топшиноева З.Н., Бухалова Д.Г.* Система NaBr–Na_2CrO_4 // Журн. неорган. химии. 1975. Т. 20. № 4. С. 615.
21. *Кочкаров Ж.А., Локьяева С.М.* Четырехкомпонентная взаимная система Na, K||CO_3, MoO_4, WO_4 // Журн. неорган. химии. 2004. Т. 49. № 11. С. 1890.
22. *Вердиева З.Н., Алхасов А.Б., Мусаева П.А., Вердиев Н.Н.* Теплоаккумулирующий материал. Патент РФ на изобретение № 2703220. Кл. МПК-C09K 5/06. 15.10.2019.
23. *Омарова С.М., Вердиева З.Н., Алхасов А.Б., Магомедбеков У.Г., Арбуханова П.А., Вердиев Н.Н.* Фазовые равновесия в системе $(LiF)_2$–$(NaCl)_2$–Na_3FSO_4 // Изв. вузов. Химия и хим. технология. 2017. Т. 60. № 10. С. 4.
24. *Ганин Н.Б.* Трехмерное проектирование в КОМПАС-3D. Сер. Проектирование. М.: Изд-во ДМК-Пресс, 2012. 784 с.

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР, 2021, том 59, № 1, с. 86–99

ТЕПЛОМАССООБМЕН И ФИЗИЧЕСКАЯ ГАЗОДИНАМИКА

УДК 532.529, 536.423.1

ПАРОВАЯ ПЛЕНКА НА ПЛОСКОЙ ГОРЯЧЕЙ ВЕРТИКАЛЬНОЙ ПОВЕРХНОСТИ

© 2021 г. О. А. Синкевич*

Национальный исследовательский университет Московский энергетический институт, Москва, Россия

**E-mail: oleg.sinkevich@itf.mpei.ac.ru*

Поступила в редакцию 17.01.2020 г.
После доработки 24.06.2020 г.
Принята к публикации 24.06.2020 г.

Исследован процесс пленочного кипения в системе пар–жидкость, находящейся в открытом сверху прямоугольном бассейне, одна из вертикальных стенок которого нагрета до температуры, превышающей температуру кипения жидкости. Особенностью данного процесса является постоянное истечение пара в окружающую среду и то, что толщина паровой пленки состоит из стационарной части и волн, распространяющихся по фазовой поверхности. В стационарном анализе исследован специальный режим невязкого вихревого течения. Методом многомасштабных асимптотических разложений построены решения уравнений сплошной среды и найдена форма фазовой границы, разделяющей пар, примыкающий к горячей вертикальной стенке, и холодную жидкость. Найденное решение позволяет рассчитать характеристики теплообмена. Исследована устойчивость полученной стационарной конфигурации пара и жидкости и разделяющей их фазовой границы. Показано, что вдоль границы распространяются волны, отличающиеся от известных гравитационных волн в жидкости в изотермической среде. Как и при пленочном кипении на горизонтальной поверхности, генерация этих поверхностных волн в неизотермической среде связана с изменением потока теплоты при искривлении и смещении фазовой поверхности и зависимостью давления насыщения от температуры. Аналогично известному эффекту Гиббса–Томсона деформация фазовой поверхности приводит к изменению температуры кипения и, соответственно, давления насыщения. В работе выделяется три класса течений сред по вертикальной поверхности (слой жидкости, слой образующегося конденсата, пленка пара), общим для которых является наличие волновой границы раздела сред.

DOI: 10.31857/S0040364421010130

ВВЕДЕНИЕ

Волновые течения тонких слоев жидкости или ее пара (газа) по вертикальной или наклонной твердой поверхностям под действием силы тяжести часто встречаются в природе и многих технических приложениях. В механике жидкости, газа и плазмы существует три больших класса задач, связанных с движением жидкости или ее пара по вертикальной поверхности, которые представляют большой интерес как для теории, так и для ее приложений. Общее для всех трех типов течения по вертикальной или наклонной твердой поверхностям (слой жидкости, граничащей с газом; слой конденсата, граничащего с паром; пленка пара, граничащая с жидкостью) заключается в том, что эти течения являются волновыми, несмотря на их различную физическую природу.

Первые два класса задач относятся к течениям жидкости, но отличаются способом образования самой жидкости и поддержанием ее расхода. В работах П.Л. Капицы [1–3], относящихся к первому классу задач, теоретически и экспериментально исследовано течение слоя вязкой жидкости по вертикальной стенке при заданном расходе $G = \mathrm{const}$. В теоретическом анализе автор показал, что волновой режим поверхности стекающего слоя жидкости является более устойчивым по сравнению со слоем постоянной толщины [1]. В волновом режиме толщина слоя $h = h_0 + \delta h(z,t)$ состоит из постоянной части $h_0 = \mathrm{const}$ и волны $\delta h \cos[k(z+ct)]$, $\delta h/h \ll 1$, движущейся с постоянной фазовой скоростью c. Фазовая скорость и величины h_0, k, δh зависят от физических свойств жидкости и ее расхода через слой $G = \mathrm{const}$.

Необходимость анализа устойчивости стационарного режима подтверждается примером последующих исследований задачи П.Л. Капицы. Более детальный математический анализ этой задачи, выполненный в работе [4], показал: при заданном расходе стекающей в слое жидкости $G = \mathrm{const}$ существует бесконечное множество волновых режимов, отличающихся длинами волн. Поэтому перенос результатов работы [1] (особенно зависимости усредненной толщины слоя жидкости от расхода) на другие задачи без дополнительного анализа может привести к ошибочным выводам [5].

Второй близкий класс задач связан с анализом двухфазных сред (жидкость и ее пар) [5, 6]. В этих задачах конденсация пара на твердой холодной поверхности приводит к образованию стекающего по стенке слоя жидкости. Типичная проблема для таких явлений сводится к нахождению зависимости стационарной толщины слоя жидкости $x_f(z)$ от расстояния z. Отличие работ этого класса от [1–5] состоит в том, что расход в стекающей жидкости $G(z, J)$ изменяется по высоте и зависит от интенсивности конденсации пара J на холодной стенке. Задача о границе между паром, находящимся в объеме, и сконденсировавшейся на холодной поверхности жидкостью $x_f(z) \approx z^{1/4}$ впервые была решена Нуссельтом (W. Nusselt). Полученное на основе этого решения значение среднего по высоте коэффициента теплоотдачи, несмотря на некоторые поправки, учитывающие реальный волновой характер границы раздела пар–жидкость, широко используется в различных технологиях (ссылки на работы в данной области можно найти в [7, 8]). В задаче, рассмотренной Нуссельтом, и последующих исследованиях конденсации пара на различных поверхностях детальный анализ устойчивости полученных стационарных решений остался до конца не выполненным.

Третий большой класс задач, к которому относится и настоящая, так же, как и второй, связан с двухфазными средами (жидкость и ее пар). Изучаются явления, связанные с пленочными режимами кипения обычных и криогенных жидкостей на нагретых до высокой температуры цилиндрических или сферических металлических поверхностях (при различных значениях недогрева охлаждающей жидкости). Эти процессы наблюдаются в технологических установках, при изучении механизмов кипения в лабораториях и в природе при извержении подводных вулканов, когда лава вытекает в морскую воду. Особенностью задач третьего класса является то, что режим пленочного кипения сопровождается постоянным истечением пара в окружающую среду. Истечение пара в окружающую среду может быть либо периодическим, если нагреватель целиком окружен охлаждающей жидкостью и расход пара происходит за счет отрывающихся от фазовой поверхности паровых пузырей, либо постоянным, если паровая полость соприкасается с окружающей средой непосредственно. Большинство проблем в рассмотренных задачах этого класса [3–13] сводятся к определению формы стационарной фазовой границы на нагретых цилиндрических или сферических поверхностях (при наличии вынужденной или естественной конвекции жидкости) и расчету среднего по периметру значения коэффициента теплоотдачи. Теоретический анализ, проведенный в этих задачах, связан с рассмотрением стационарных состояний и детально не затрагивает вопросов анализа единственности и устойчивости этих режимов относительно малых и конечных возмущений.

Рассматриваемый в данной работе режим пленочного кипения на плоской, вертикальной стенке существенно отличается от режимов, рассмотренных в [3–13], в которых отсутствует вынужденное обтекание нагревателя жидкостью. В нашем случае паровая полость соприкасается с окружающей средой непосредственно и существует постоянный расход пара. Здесь поток теплоты от горячей стенки идет на нагрев и испарение новых порций жидкости и на поддержание непрерывного расхода пара. Истечение пара здесь происходит не под воздействием силы Архимеда, а за счет того, что давление в паровой пленке превышает давление в окружающей среде, когда пар вытекает. При пленочном кипении на горизонтальных трубах или сферах объем пара, находящегося возле нагревателя, окружен охлаждающей жидкостью. Поэтому пар из замкнутого объема, ограниченного фазовой поверхностью, расходуется малыми порциями из-за отрывающихся и затем всплывающих в жидкости за счет силы Архимеда паровых пузырей. При этом тепловой поток от нагревателя тратится на небольшое квазипериодическое воспроизводство ушедшего с пузырями пара и на поддержание конвекции в жидкости.

Вторая проблема, рассматриваемая в данной работе, относится к анализу устойчивости стационарного пленочного кипения на вертикальной поверхности. Необходимость анализа устойчивости квазистационарных состояний можно видеть и на примерах распространения плоских ударных волн [14] и одномерной задачи Стефана (Jožef Stefan). В этих задачах плоская фазовая граница перемещается в горизонтальном направлении (в задаче Стефана по закону $x_f(t) \approx \sqrt{\chi t}$, χ – коэффициент температуропроводности). Хотя эта задача относится к одномерной нестационарной постановке, она демонстрирует необходимость анализа устойчивости простейших решений. Задачи Стефана возникают при плавлении твердых тел и кристаллизации жидкости и демонстрируют неустойчивость плоского фронта кристаллизации. Именно анализ двумерных нестационарных возмущений позволяет реализовывать технологии обеспечения гладкой фазовой поверхности. В двумерной геометрии определение положения и формы фазовой границы требует более тонкого анализа. Аналогичные соображения относятся и к стационарным решениям, полученным в [5–13].

Главной целью работы является более детальный и математически более строгий анализ решений о пленочном кипении на плоской вертикальной поверхности. Первая часть данной работы посвящена анализу стационарных распределений специального вида в двухфазной системе и определению формы границы, отделяющей пар от жидкости. Решение гидродинамических уравнений проводится методом многомасштабных асимптотических разложений. Часто авторы качественных инженерных решений полагают, что полученные ими решения единственны, даже для вполне конкретной экспериментальной ситуации. Однако, как показывает анализ целого ряда гидродинамических задач [14], частные стационарные решения могут быть не единственными и не устойчивыми даже к малым возмущениям и не реализовываться в эксперименте. В отличие от других задач пленочного кипения особенностью данного подхода является представление о том, что толщина паровой пленки в таких процессах состоит из стационарной части и поверхностных волн, распространяющихся по фазовой границе. Это относится к режимам пленочного кипения как на плоских горизонтальных и вертикальных поверхностях, так и на трубах и сферах. Поэтому отдельный раздел данной работы специально посвящен исследованию устойчивости стационарной конфигурации пара, жидкости и разделяющей их фазовой границы. В этом разделе показаны отличия волн на фазовой поверхности от хорошо известных гравитационно-капиллярных волн на поверхности изотермической жидкости [14].

СТАЦИОНАРНЫЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ СВОЙСТВ СРЕДЫ В ДВУХФАЗНОЙ СИСТЕМЕ. ФОРМА ФАЗОВОЙ ГРАНИЦЫ ПАР–ЖИДКОСТЬ (ЧАСТНЫЙ РЕЖИМ)

Постановка задачи

Исследование пленочного кипения на вертикальной нагретой поверхности проводится для открытого сверху прямоугольного сосуда. Сосуд с характерными размерами L_x, L_y, L_z в направлении осей X, Y, Z заполнен жидкостью до уровня $h < L_z$ (рис. 1), а его левая плоская вертикальная стенка $0gdc0$ нагрета до температуры T_w, существенно превышающей температуру кипения ($T_b(P_b) < T_w$) жидкости при постоянном давлении в области над жидкостью. Считается, что остальные стенки адиабатически изолированы — нормальный к стенке градиент температуры равен нулю. При нагреве жидкости после переходного режима на стенке образуется паровая область, отделенная от жидкости фазовой поверхностью *abefa* (рис. 1а). Проекция фазовой поверхности на плоскость $Z0X - x = x_b(z)$ изображена на рис. 1б. В процессе решения задачи находится форма границы, отделяющей жидкость от пара $x_b(z)$, $0 \le z \le h$, а также распределения температуры, давления и скорости течения в паре и жидкости. Решение задачи

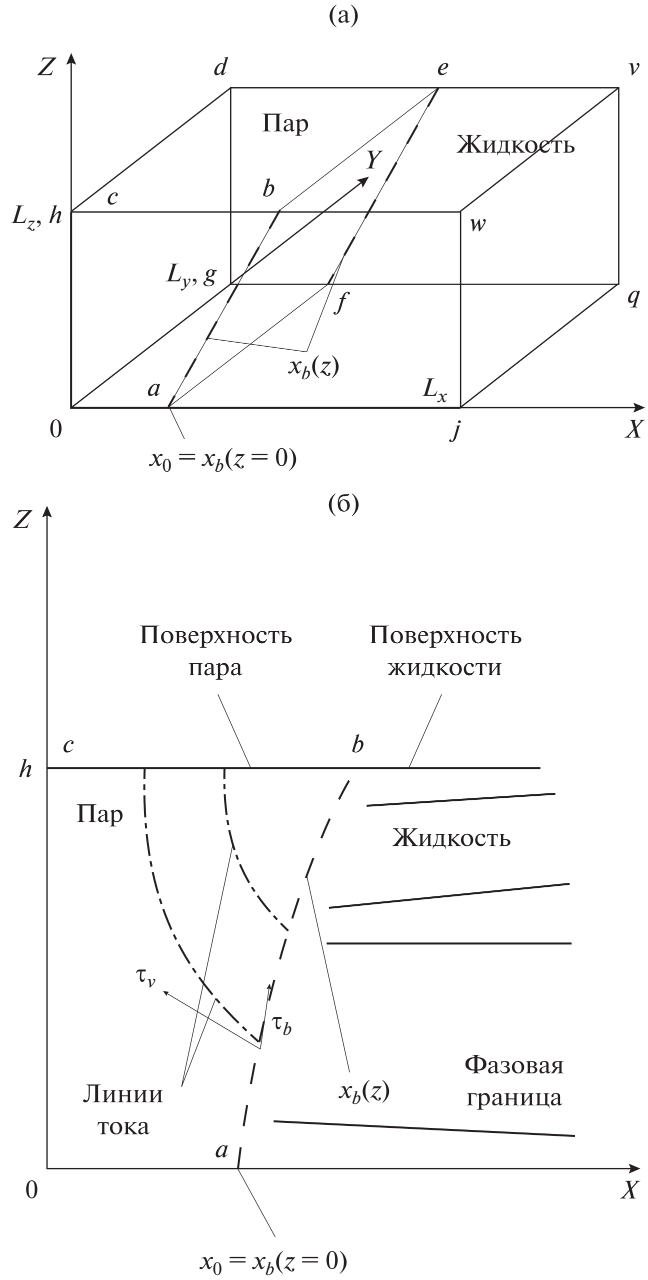


Рис. 1. Схема (а) расположения пара и жидкости в бассейне размером $L_x \times L_y \times L_z$: $0abcdefg0$ — область, заполненная паром; *ajwbevqfa* — жидкостью; *afeba* — фазовая поверхность; б) плоскость $X0Y$ бассейна $L_x \times L_y \times L_z$: *ab* — след проекции фазовой плоскости на плоскость $X0Y$; $0abc0$ — область пара; область справа от линии *ab* — жидкость; штрихпунктирные линии — линии тока пара; $\boldsymbol{\tau}_v(\mathbf{x_b}(z))$, $\boldsymbol{\tau}_b(\mathbf{x_b}(z))$ — касательные векторы к линии тока и фазовой границе соответственно, взятые в произвольной точке фазовой границы $\mathbf{x_b}(z)$.

позволяет найти расход пара G_-, вытекающего из паровой области через поверхность *bcdeb*. Считается, что уход испарившейся жидкости компенсируется дополнительным ее поступлением в сосуд G_l через поверхность $jwvqj$ так, чтобы уровень жидкости оставался постоянным $h = \text{const}$.

Область пара. Следуя идее, высказанной в работе [15] и используемой ее автором для определения критического потока теплоты, при анализе процессов в паровой пленке можно ограничиться рассмотрением невязкого вихревого течения пара.

Система уравнений, описывающая распределение свойств пара, сводится к решению уравнений

$$\begin{gathered}\nabla\cdot\rho_v\mathbf{U}_v = 0,\ \ [\nabla\times\mathbf{U}_v\times\mathbf{U}_v] = \\ = -\left(\frac{1}{\rho_v}\nabla P_v + \frac{1}{2}\nabla\mathbf{U}_v^2\right) - \mathbf{g} + \mu_v\Delta\mathbf{U}_v, \qquad (1)\\ c_{pv}\rho_v(\mathbf{U}_v\cdot\nabla)T_v - \lambda_v\Delta T_v = 0,\ \ P_v = R_v\rho_vT_v.\end{gathered}$$

Система уравнений, описывающая распределение параметров жидкости пара, сводится к решению уравнений

$$\begin{gathered}\nabla\cdot\mathbf{U}_l = 0,\ \ \left(\frac{1}{\rho_l}\nabla P_l + \frac{1}{2}\nabla\mathbf{U}_l^2\right) - \mathbf{g} + \mu_l\Delta\mathbf{U}_l = 0, \\ c_{pl}\rho_l(\mathbf{U}_l\cdot\nabla)T_l - \lambda_l\Delta T_l = 0,\ \ \rho_l = \text{const}.\end{gathered} \qquad (2)$$

Здесь P_j, ρ_j, T_j, $\mathbf{U}_v = (u, 0, w)$, $\mathbf{U}_l = (u_l, 0, w_l)$ – давление, плотность, температура и скорость соответственно; λ_j, c_{pj} – коэффициенты теплопроводности и теплоемкости; $\mathbf{g} = g(0, 0, 1)$ – сила тяжести; μ_j – коэффициент кинематической вязкости; Δ – оператор Лапласа; $j = v, l$ – нижний индекс v соответствует пару, l – жидкости.

При решении поставленной задачи используется метод многомасштабных асимптотических разложений [16, 17]. Далее рассматривается плоская задача, в которой зависимые переменные $f(x, z)$ являются функциями только от координат x, z (рис. 1а). В данной задаче существует малый параметр $\varepsilon < 1$, численное значение которого будет установлено позже, поэтому выбирается следующий скейлинг для производных от функций $f(x, z)$:

$$\frac{\partial f}{\partial z}\Big/\frac{\partial f}{\partial x} \approx \varepsilon^4 \ll 1. \qquad (3)$$

При решении системы уравнений (1), (2) считается, что нормальные к твердым стенкам компоненты скорости обращаются в ноль (более детально это будет записано при решении конкретной задачи).

На стационарной фазовой границе $x_b(z)$, которая находится в процессе решения, должно выполняться условие непрерывности потоков массы

$$\rho_vU_{vn} = \rho_lU_{ln}, \qquad (4)$$

где U_{jn} – нормальная к фазовой границе компонента скорости среды j.

Граничные условия, используемые при решении уравнений системы (1), (2), описывающих распределение температуры в паре и жидкости на твердых стенках, представлены далее при решении конкретной задачи.

На фазовой границе $x = x_b(z)$ должны выполняться следующие условия.

Равенства нормальных и касательных напряжений в паре и жидкости

$$\hat{P}_{vn} - \hat{P}_{ln} = 0,\ \ \hat{P}_{v\tau} - \hat{P}_{l\tau} = 0$$

для рассматриваемого вида течения сводятся к

$$P_v = P_l = P_b(T_b). \qquad (5)$$

Равенства температур и нормальных к фазовой границе потоков:

$$\begin{gathered}T_v = T_l = T_b,\ \ \rho_bi_bU_b(x_b(z), z) = \\ = \left[-\lambda_v\frac{\partial T_v}{\partial n} + \lambda_l\frac{\partial T_l}{\partial n}\right]_{x_b(z),z}.\end{gathered} \qquad (6)$$

Здесь $\hat{P}_j$ – тензор напряжений; $P_b(T_b)$ – давление насыщения пара, зависящее от температуры кипения T_b; i_b – теплота парообразования (конденсации); $\dfrac{\partial T_v}{\partial n}$ – градиент температуры в направлении нормали к фазовой поверхности; $U_b(x_b(z), z)$ – интенсивность парообразования на фазовой границе.

Уравнение (6) демонстрирует то, что разность между потоком теплоты, приходящим на фазовую поверхность, и потоком, уходящим с нее, идет на испарение жидкости.

Распределение параметров пара. Рассмотрим распределение параметров пара в области между стенкой $0cdg0$ и фазовой плоскостью $abefa$, считая, что имеет место следующее неравенство:

$$U_{vn} \ll a_{vs} \equiv a_s,$$

где a_{vs} – скорость звука в паре.

Плотность пара может быть представлена в виде суммы

$$\rho_v = \rho_b + \delta\rho(x, z),$$

где $\rho_b = \text{const}$ – плотность пара при температуре кипения T_b и давлении $P_b(T_b)$, $\delta\rho/\rho_b \approx \varepsilon \ll 1$. Использование условий

$$\rho_v = \rho_b = \text{const}\ \text{и}\ \nabla\cdot\mathbf{u} = 0 \qquad (7)$$

можно оправдать тем, что в стационарном случае из уравнения $\mathbf{u}\cdot\dfrac{\partial\ln\rho}{\partial\mathbf{r}} = -\dfrac{\partial}{\partial\mathbf{r}}\cdot\mathbf{u}$ следует оценка $|\Delta\ln\rho| < \dfrac{\Delta u}{u}$, где Δf – характерное изменение величины f. Таким образом, с учетом (7) первое уравнение системы (1) с точностью до малого параметра ε принимает вид

$$\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial w}{\partial z}=0. \tag{8}$$

Это уравнение решается с граничными условиями

на твердых стенках

$$u(x=0,z)=0,\quad w(0\le x\le x_b(z=0),z=0)=0,$$
$$U_b(x_b(z),z)=\sqrt{u_b^2+w_b^2}\equiv U_v(x_b(z),z), \tag{9}$$

на фазовой границе $x=x_b(z),z.$

Здесь $u_b=u(x=x_b(z),z)$, $w_b=w(x=x_b(z),z)$, $0\le z\le h.$

Рассмотрим специальный вид течения. Несмотря на то что в области пара $\rho_v\approx \text{const}$, на фазовой границе приходящий от горячей стенки тепловой поток вызывает интенсивную генерацию пара и при $x=x_b(z)$ $\nabla\rho_v=\delta((x-x_b(z)))\neq 0.$ Наличие $\nabla\rho_v(x=x_b(z))\neq 0$ приводит к генерации вихревого движения пара $\mathbf{\Omega}=\nabla\times\mathbf{u}$ согласно известному механизму

$$(\mathbf{u}\cdot\nabla)\mathbf{\Omega}=\nabla\rho_v\left(x_b\left(z\right)\right)\times\mathbf{g}.$$

В невязком вихревом течении вихрь $\mathbf{\Omega}=\nabla\times\mathbf{u}\neq 0$ переносится вдоль линий тока $(\mathbf{u}\cdot\nabla)\mathbf{\Omega}=0.$ Именно поэтому коэффициент вязкости так же, как и в рассмотренной в [15] задаче, не входит в окончательные решения. Сила Архимеда участвует в создании вихря только на фазовой границе. Далее пар продолжает двигаться по инерции согласно принципу минимальности сопротивления. Проходя вдоль стенки, пар выходит в окружающее пространство, где давление P_+ ниже, чем давление в паровой пленке P_b: $P_+<P_b$.

В этом случае решение уравнения (8) с граничными условиями (9) выражается через функцию тока

$$\mathbf{u}\left(x,z\right)=\nabla\times\mathbf{\Psi}\left(x,z\right).$$

Здесь $\mathbf{\Psi}=\mathbf{e}_y\Psi(x,z)=\varepsilon^m u_0 zx/h$, $\mathbf{e}_y$ – единичный вектор в направлении оси y, $\mathbf{\Omega}=\nabla\times\mathbf{u}=-\Delta\mathbf{\Psi}.$

В этом случае компоненты скорости пара $\mathbf{U}_v=(u,0,w)$ имеют вид

$$u=-\frac{\partial\psi}{\partial z}=-\varepsilon^m u_0\frac{x}{h},\quad w=\frac{\partial\psi}{\partial x}=\varepsilon^m u_0\frac{z}{h}. \tag{10}$$

Множитель $u_0\approx 1$ и показатель степени m определяются в ходе решения задачи.

Для безвихревого течения (10) выполняются следующие равенства:

$$\left[\nabla\times\mathbf{U}_v\times\mathbf{U}_v\right]=0,\quad \mu_j\Delta\mathbf{U}_j=0,\quad j=v,l,$$

которые означают, что вязкость не оказывает влияния на данный вид течения и граничные условия для давления на фазовой границе сводятся к уравнению (5). При этом решение уравнения сохранения импульса системы (1), записанное в форме Громеки–Лэмба, с граничным условием на фазовой границе (9) сводится к виду

$$P_v(x=x_b(z),z)=P_b-(\rho_b/2)\mathbf{U}_b^2+\rho_b gz,$$
$$0\le z\le h.$$

Таким образом, с точностью до малого параметра $\varepsilon^{2m}\ll 1$ и учетом неравенства $\rho_b gh/P<1$ распределение давления пара сводится к виду

$$P_v\left(x,y\right)=P_b=\text{const}.$$

С учетом ранее полученных решений для скорости пара (10) уравнение сохранения энергии системы (1) имеет вид

$$c_{pv}\rho_b\left(-\varepsilon^m u_0\frac{x}{h}\frac{\partial T_v}{\partial x}+\varepsilon^m u_0\frac{z}{h}\frac{\partial T_v}{\partial z}\right)=$$
$$=\lambda_{v1}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)T_v. \tag{11}$$

Это уравнение должно решаться со следующими граничными условиями:

на твердых стенках

$$T_v(x=0,\ 0\le z\le h)=T_w=\text{const}>T_b,$$
$$\frac{\partial T_v}{\partial z}(0\le x\le x_0,\ z=0)=0,$$

на фазовой границе

$$T_v(x_b(z),z)T_b=\text{const},$$

на границе выхода пара в пространство над жидкостью

$$\frac{\partial T_v}{\partial z}(0\le x\le x_b(z=h),z=h)=0.$$

Здесь $T_w>T_b$ – температура горячей стенки, $\lambda_{v1}=\text{const}$ – коэффициент теплопроводности пара при температуре $T_v=(T_w+T_b)/2$.

С учетом граничных условий (9) и малых параметров, входящих в уравнение (11), распределение температуры пара в области $0\le x\le x_b(z)$, $0\le z\le h$ имеет вид

$$T_v(x,z)=T_w-(T_w-T_b)\frac{x}{x_b(z)}. \tag{12}$$

Распределение параметров жидкости. При расчете распределений параметров жидкости учтем следующее неравенство:

$$\rho_v\ll\rho_l=\text{const}.$$

В этом случае первое уравнение системы (2) сводится к

$$\frac{\partial u_l}{\partial x}+\frac{\partial w_l}{\partial z}=0. \tag{13}$$

Это уравнение решается с граничными условиями
на дне сосуда и на свободной поверхности жидкости

$$w_l = 0 \text{ при } x_0 \le x \le L_x, \quad z = 0, \\ x_b(z = h) \le x \le L_x, \quad z = h, \tag{14}$$

и на фазовой границе – условие (4).

С учетом неравенства (3) и граничного условия (14) решение уравнения (13) принимает вид

$$u_l(z) \ne 0, \quad w_l = 0.$$

Используя условие (4), находим

$$u_l(x = x_b(z), z) = \\ = \frac{\rho_b}{\rho_l} u(x = x_b(z), z) = -\varepsilon^m \frac{\rho_b}{\rho_l} u_0 \frac{x_b(z)}{h}.$$

С учетом неравенства (3) уравнение сохранения энергии системы (2) записывается так

$$\lambda_l \frac{\partial^2}{\partial x^2} T_l + c_{pl}\rho_l u_l \frac{\partial T_l}{\partial z} = \lambda_l \frac{\partial^2}{\partial x^2} T_l + \\ + c_{pl}\rho_b u_l \varepsilon^m u_0 \frac{x_b}{h} \frac{\partial T_v}{\partial z} = 0.$$

Это уравнение решается со следующими граничными условиями:

$$T_l(x \to \infty) \to T_0 < T_b, \quad T_l(x = x_b) = T_b \tag{15}$$

на фазовой границе.

Здесь T_0 – температура жидкости, недогретой до кипения; λ_l – коэффициент теплопроводности жидкости при температуре T_l.

С учетом граничных условий (15) распределение температуры в жидкости выглядит как

$$T_l(x, z) = (T_b - T_0) \times \\ \times \exp[-c_{pl}\rho_b \varepsilon^m u_0 (x - x_b(z))/h\lambda_l] + T_0. \tag{16}$$

Для скорости генерации пара на фазовой границе

$$U_b(x = x_b(z), z) = \frac{1}{\rho_b i_b}\left[-\lambda_v \frac{\partial T_v}{\partial x} + \lambda_l \frac{\partial T_l}{\partial x}\right]_{x = x_0, z}, \tag{17}$$

с учетом уравнений (12) и (16) из (17) и с точностью до малого параметра $\varepsilon^{m+n} \ll 1$ получается

$$U_b(x = x_b(z), z) = \lambda_v \frac{T_w - T_b}{x_b(z)\rho_b i_b}.$$

Подчеркнем еще раз, в данной модели сила Архимеда участвует в создании вихря на фазовой границе, но далее пар начинает двигаться по инерции согласно принципу минимальности сопротивления вдоль стенки и выходить в окружающее пространство.

Истечение пара происходит не за счет силы Архимеда, а вследствие того, что образовавшийся пар начинает двигаться согласно принципу минимальности сопротивления вдоль стенки и выходить в окружающее пространство. Именно поэтому коэффициент вязкости так же, как и в рассмотренной в [15] задаче, не входит в окончательные решения.

Стационарная граница раздела фаз

Перейдем к нахождению фазовой границы, отделяющей жидкость от пара (линия ab на рис. 1б). Дальнейший анализ базируется только на предположении о том, что толщина пленки пара $x_b(z)$ меньше высоты сосуда h:

$$x_b(z) \ll h, \quad 0 \le z \le h.$$

Уравнение фазовой границы ищется в виде

$$F_b = x - \varepsilon^n x_b(z) = 0, \quad x_b(z = 0) = x_0, \\ \varepsilon < 1, \quad n > 1. \tag{18}$$

Здесь $x_b(z)$ – уравнение проекции фазовой поверхности *afeba* на плоскость $X0Z$ (рис. 1б), которое, как и показатель степени n, должно быть определено в процессе решения задачи.

Образование пара, происходящее при испарении жидкости, и начало движения пара происходят на фазовой границе. Линии тока пара, начинающиеся на фазовой границе, уходят на линию $0 \le x \le x_b$ $(z = h)$ (cb на рис. 1б) и затем переходят в свободное пространство $z > h$. В таком случае существует связь между положением фазовой границы и линиями тока, начинающимися на ней. Поэтому в качестве гипотезы, позволяющей найти уравнение фазовой границы, принимается предположение о том, что вектор $\boldsymbol{\tau}_v$, касательный к линии тока пара в точке $(x_b(z), z)$, $0 \le z \le h$, перпендикулярен вектору $\boldsymbol{\tau}_b$, касательному к фазовой границе в этой же точке. Другими словами, нормаль к фазовой границе в точке $(x_b(z), z)$ совпадает с вектором $\boldsymbol{\tau}_v$, касательным к линии тока пара в этой же точке.

Согласно соотношению (10), уравнение линии тока пара на плоскости $X0Z$ имеет вид

$$\psi(x, z) = C, \quad C = \text{const или } z = hC/x.$$

Отсюда находится касательный к линии тока вектор, взятый на фазовой границе в точке $(x = x_b(z), z)$:

$$\boldsymbol{\tau}_u(x = x_b(z), z) = -\frac{z}{x_b}(\cos\varphi_u, 0, \sin\varphi_u).$$

Соответственно, касательный к линии фазовой границы (18) вектор, взятый в точке $(x = x_b(z), z)$, имеет вид

$$\boldsymbol{\tau}_b(x = x_b(z), z) = \frac{1}{(dx_b/dz)}(\cos\varphi_b, 0, \sin\varphi_b). \tag{19}$$

Здесь

$$
\sin\varphi_u = \frac{\mathrm{tg}\varphi_u}{\sqrt{1+(\mathrm{tg}\varphi_u)^2}},\quad \cos\varphi_u = \frac{1}{\sqrt{1+(\mathrm{tg}\varphi_u)^2}},
$$

$$
\mathrm{tg}\varphi_u = \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_u = -\frac{z}{x_b},\quad \sin\varphi_b = \frac{\mathrm{tg}\varphi_b}{\sqrt{1+(\mathrm{tg}\varphi_b)^2}},
$$

$$
\cos\varphi_b = \frac{1}{\sqrt{1+(\mathrm{tg}\varphi_b)^2}},\quad \mathrm{tg}\varphi_b = \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_b = \tag{20}
$$

$$
= -\frac{\partial F_b}{\partial x}\bigg/\frac{\partial F_b}{\partial z} = \frac{1}{dx_b/dz}.
$$

Согласно высказанной выше гипотезе о расположении в точке ($x = x_b(z)$, z) векторов $\boldsymbol{\tau}_u$, $\boldsymbol{\tau}_b$, касательных к линии тока и фазовой границе, имеем

$$
\boldsymbol{\tau}_u\left(x = x_b(z), z\right)\cdot\boldsymbol{\tau}_b\left(x = x_b(z), z\right) = 0 \tag{21}
$$

и

$$
\varphi_u = \varphi_b + \pi/2. \tag{22}
$$

С использованием уравнений (19)–(22) получается уравнение для фазовой границы, отделяющей область пара от жидкости:

$$
x_b\frac{dx_b}{dz} = z,
$$

решение которого с граничным условием

$$
x_b(z=0) = x_0
$$

имеет вид

$$
x_b(z) = \varepsilon^n\sqrt{z^2 + x_0^2}. \tag{23}
$$

Величины x_0, u_0, ε так же, как и показатели степеней n, m, должны быть определены из условий сохранения потоков массы и энергии пара.

Условие сохранения потока массы пара сводится к равенству потока массы G_+, возникающего при испарении жидкости на фазовой плоскости *abefa*, потоку массы G_-, уходящей из области пара через плоскость *abdf*.

Поток массы G_+ рассчитывается как

$$
G_+ \equiv L_y\rho_b\int_a^b U_b(x = x_b(z), z)dl = \tag{24}
$$

$$
= L_y\lambda_v\frac{T_w - T_b}{\varepsilon^n\rho_b i_b}I_1(\tilde{x}_0).
$$

Здесь

$$
dl = \sqrt{1+\left(\varepsilon^n\frac{dx_b}{dz}\right)^2}dz = \left[1+\varepsilon^{2n}\frac{z^2}{2\left(z^2+x_0^2\right)}\right]dz
$$

— элемент длины фазовой границы,

$$
I_1(\tilde{x}_0) = \int_0^h\frac{1}{\sqrt{z^2+x_0^2}}dz = \ln\left(\frac{1+\sqrt{1+\tilde{x}_0^2}}{1+\tilde{x}_0}\right).
$$

Аналогично записывается поток массы G_-

$$
G_- \equiv L_y\rho_b\int_0^{\varepsilon^n x_b^{(h)}} w(x, z=h)dx = L_y\rho_b\varepsilon^m u_0 h\sqrt{1+\tilde{x}_0^2}. \tag{25}
$$

С помощью уравнений (24), (25) равенство потоков $G_+ = G_-$ сводится к виду

$$
G_+ \equiv L_y\lambda_v\frac{T_w - T_b}{\varepsilon^n\rho_b i_b}\ln\left(\frac{1+\sqrt{1+\tilde{x}_0^2}}{1+\tilde{x}_0}\right) = G_- \equiv
$$

$$
\equiv L_y\rho_b\varepsilon^m u_0 h\sqrt{1+\tilde{x}_0^2}.
$$

Полученное уравнение может быть преобразовано к следующему соотношению, связывающему величины u_0, x_0 и индексы m, n:

$$
\varepsilon^{m+2n}\tilde{u}_0\sqrt{1+(\tilde{x}_0)^2} = \Lambda\ln\left(\frac{1+\sqrt{1+\tilde{x}_0^2}}{1+\tilde{x}_0}\right). \tag{26}
$$

Здесь $\tilde{u} = u_0/a_s$, $\tilde{x}_0 = x_0/h$, безразмерный параметр

$$
\Lambda = \lambda_v\frac{T_w - T_b}{a_s\rho_b i_b h}. \tag{27}
$$

Безразмерный параметр Λ аналогичен критерию Стентона St, но отличается от последнего тем, что в знаменателе дроби $\dfrac{\lambda_v(T_w - T_b)/h}{a_s\rho_b i_b}$ фигурирует скорость звука a_s и теплота парообразования $i_b \equiv h_{\mathrm{lg}}$. Для характерных параметров пленочного кипения Λ можно представить в виде

$$
\Lambda = \Lambda_0\times 10^{-s} \ll 1,\quad s > 1,\quad \Lambda_0 \approx 1.
$$

Величины Λ_0, s зависят от рода кипящей жидкости, ее давления и температур T_w, T_b.

Рассмотрим теперь условие сохранения потоков энергии в паре. Это условие сводится к тому, что энергетический поток от горячей поверхности (твердой стенки) S_w тратится на: 1) нагрев и превращение жидкости в пар S_b; 2) унос с энтальпией торможения пара, уходящего через поверхность *bcdeb* (рис. 1а) в свободное пространство S_-; 3) унос энергии в жидкость за счет теплопроводности через поверхность *abefa* (рис. 1а) S_{l-}; 4) унос энергии из области пара во все стороны за счет излучения S_r:

$$
S_w = S_b + S_- + S_{l-} + S_r. \tag{28}
$$

Входящие в уравнение (28) потоки имеют следующий вид:

$$
S_w \equiv L_y\lambda_v(T_w - T_b)\int_0^h\frac{1}{\varepsilon^n\sqrt{z^2+x_0^2}}dz = \tag{29}
$$

$$
= \varepsilon^{-n}L_y\lambda_v(T_w - T_b)I_1(\tilde{x}_0)
$$

– поток энергии, идущий в область пара с горячей стенки;

$$S_b \equiv L_y \rho_b c_p T_b \int_a^b U_b(x = x_b(z), z) dl = \\ = L_y \lambda_v \varepsilon^{-n} \frac{T_w - T_b}{i_b} c_p T_b I_1(\tilde{x}_0) \quad (30)$$

– поток энергии, идущий на образование пара на фазовой плоскости *abde*;

$$S_- \equiv \rho_b \int_c^b c_p T_v w \big|(x, z = h) dx = L_y \rho_b \varepsilon^{m+n} u_0 c_p \times \\ \times \frac{T_w + T_b}{2} \sqrt{1 + \tilde{x}_0^2} \quad (31)$$

– поток энергии, уносимый через плоскость *cbdf* уходящим паром;

$$S_{l-} = -L_y \int_a^b \lambda_l \frac{\partial T_l}{\partial x}\Big]_{x = x_0, z} dl = \\ = (T_b - T_0) c_{pl} \rho_0 \varepsilon^{m+n} u_0 I_2(\tilde{x}_0), \quad (32) \\ I_2(\tilde{x}_0) = \int_0^1 \sqrt{\xi^2 + (\tilde{x}_0)^2} d\xi$$

– поток энергии, уходящий с фазовой плоскости в жидкость, находимый с учетом распределения температуры в жидкости (16).

Расчет энергии, уносимой излучением из области пара в область над паром и жидкостью, в саму жидкость и на стенки сосуда, представляет отдельную задачу. Согласно работе [18], лучистый теплообмен между горячей стенкой и фазовой границей может быть оценен по уравнению

$$\sigma\left(T_w^4 - T_b^4\right) \Big/ \left(\frac{1}{\varepsilon_w} + \frac{1}{\varepsilon_l} - 1\right),$$

где σ – постоянная Стефана–Больцмана; ε_w, ε_l – степени черноты стенки и жидкости соответственно. Лучистый теплообмен между объемом пара, боковыми стенками и днищем сосуда может быть оценен аналогичным образом.

Здесь суммарные потоки энергии с учетом излучения увеличиваются посредством множителей $\varsigma > 1$, $\varsigma_l > 1$ (т.е. доля излучения в потоках S_-, S_l, уходящих из области пара, составляет величины $\varsigma - 1$, $\varsigma_l - 1$). С учетом этого поток, уносимый излучением из области пара, учитывается следующим образом:

$$S_r = \varsigma S_- + \varsigma_l S_l.$$

Более точное значение коэффициентов $\varsigma - 1$, $\varsigma_l - 1$ может быть установлено в эксперименте.

Проводя вычисления по уравнениям (29)–(32) и подставляя эти результаты в уравнение (30), представим условие сохранения суммарного потока энергии в виде

$$\varepsilon^{m+2n} \tilde{u}_0 \left[\sqrt{1 + \tilde{x}_0^2} + 2 \frac{c_{pl}(T_b - T_0)}{\varsigma c_p (T_w + T_b)} I_2(\tilde{x}_0)\right] = \\ = 2\Lambda \frac{i_b - c_p T_b}{c_p (T_w + T_b)} I_1(\tilde{x}_0),$$

где $I_2(\tilde{x}_0) = \dfrac{1}{2}\left[\sqrt{1 + \tilde{x}_0^2} \quad + \tilde{x}_0^2 \ln\left(\dfrac{1 + \sqrt{1 + \tilde{x}_0^2}}{\tilde{x}_0}\right)\right].$

Для характерных параметров пленочного кипения безразмерный комплекс (27) можно представить в виде $\Lambda = \Lambda_0 \times 10^{-s}$, где $7 \ge s > 1$. Поэтому для обеспечения одинакового порядка по параметру $\varepsilon < 1$ всех величин, входящих в (26) и (29), выбираются следующие значения ε и связи между показателями степени m, n, s:

$$\varepsilon = \Lambda^{1/s} = 10^{-1}, \quad m + 2n = s.$$

Для рассматриваемой физической системы и конкретного значения параметра s выбор величин m, n не однозначен. Поэтому нужны либо априорная информация, получаемая на основе эксперимента, либо анализ устойчивости стационарных состояний, позволяющий отобрать устойчивые режимы пленочного кипения на вертикальной стенке.

Для кипения воды при атмосферном давлении и $T_b = 373$ K, $T_w = 383$ K параметры Λ и s принимают значения $\Lambda = 4 \times 10^5$, тогда $\Lambda_0 = 4$, $s = 5$, $\varepsilon = 4^{1/5} \times 10^{-1} < 1$. Поэтому далее с ориентировкой на многочисленные экспериментальные данные для воды выбираются

$$\varepsilon = 10^{-1}, \quad m = 2, \quad n = 3/2.$$

При таком выборе условие сохранения потока массы (27) сводится к

$$\tilde{u}_0 \sqrt{1 + \tilde{x}_0^2} = \Lambda_0 \ln\left(\frac{1 + \sqrt{1 + \tilde{x}_0^2}}{1 + \tilde{x}_0}\right), \quad (33)$$

а условие сохранения потока энергии (28) принимает вид

$$\tilde{u}_0 \left\{\sqrt{1 + \tilde{x}_0^2} + \frac{c_{pl}(T_b - T_0)}{\varsigma c_p (T_w + T_b)} \left[\sqrt{1 + \tilde{x}_0^2} + \\ + \tilde{x}_0^2 \ln\left(\frac{1 + \sqrt{1 + \tilde{x}_0^2}}{\tilde{x}_0}\right)\right]\right\} = \\ = 2\Lambda_0 \frac{i_b - c_p T_b}{\varsigma c_p (T_w + T_b)} \ln\left(\frac{1 + \sqrt{1 + \tilde{x}_0^2}}{1 + \tilde{x}_0}\right).$$

Уравнение (33) позволяет выразить $\tilde{u}_0$ через функцию параметра $\tilde{x}_0$

$$\tilde{u}_0 = \Lambda_0 \ln\left(\frac{1 + \sqrt{1 + \tilde{x}_0^2}}{1 + \tilde{x}_0}\right) \Big/ \sqrt{1 + \tilde{x}_0^2}. \quad (34)$$

Используя уравнение (34), подставим величину $\tilde{u}_0$ в (33), сведя его к уравнению для определения $\tilde{x}_0$,

$$\tilde{x}_0^2 \ln\left(\frac{1+\sqrt{1+\tilde{x}_0^2}}{\tilde{x}_0}\right) \Big/ \sqrt{1+\tilde{x}_0^2} = \eta, \qquad (35)$$

где $\eta = \dfrac{2i_b - c_p[\varsigma T_w + (2+\varsigma)T_b]}{\varsigma_l c_{pl}(T_b - T_0)} - 1.$

При $\eta > 1$ уравнение (35) не имеет решения ($\tilde{x}_0 \to \infty$ при $\eta \to 1$). Это означает, что режимы пленочного кипения на вертикальной плоскости могут реализовываться лишь при вполне определенных условиях. При $\eta < 1$ решения существуют и зависимость $\tilde{x}_0$ от свойств пара и жидкости (от параметра η) представлена на рис. 2. Например, для кипения воды при атмосферном давлении, температурах $T_b = 373$ K, $T_w = 400$ K, $T_b - T_0 = 40$ K, выбирая $\varsigma = 1.5$, $\varsigma_l = 1.25$, $m = 5$, находим $\tilde{x}_0 \approx 30.3$. При приведенных выше данных для кипения воды при атмосферном давлении характерная толщина пленки составляет величины порядка 10^2 мкм.

Используя уравнение (34), находим характерную скорость движения пара $\tilde{u}_0$, которая через параметры $\tilde{x}_0$, Λ_0 зависит от свойств испаряющейся жидкости, пара и температуры горячей стенки. На рис. 3 красным цветом представлена зависимость $\tilde{u}_0/\Lambda_0$ от параметра η. С помощью формулы (34) для $\tilde{u}_0$ можно рассчитать зависимость безразмерного потока массы пара $G_-/(L_y h\rho_b a_0)$, уходящего через плоскость *abdf* (рис. 1а), от параметров Λ_0 и η по формуле (35)

$$G_-/(L_y h\rho_b a_s) = \varepsilon^{m+n}\Lambda_0 \ln\left(\frac{1+\sqrt{1+\tilde{x}_0^2}}{1+\tilde{x}_0}\right).$$

Зависимость комплекса $G_-/(L_y h\rho_b a_s\varepsilon^{m+n})$ от η для двух значений параметра $\Lambda_0 = 0.1$, 0.9 показана на рис. 3.

Для кипения воды при атмосферном давлении и температурах $T_b = 373$ K, $T_w = 383$ K фазовая граница и скорости течения пара в размерной форме имеют вид

$$x_b = \left(\lambda_v \frac{T_w - T_b}{a_s\rho_b i_b h}\right)^{3/10} h\sqrt{\tilde{z}^2 + \tilde{x}_0^2(\eta)}, \quad 0 \le \tilde{z} \le 1,$$

$$\mathbf{u} = \tilde{u}_0(\eta)a_s\left(\lambda_v \frac{T_w - T_b}{a_s\rho_b i_b h}\right)^{2/5}\left(-\frac{x}{h}, 0, \frac{z}{h}\right).$$

Важно подчеркнуть, что, кроме размеров слоя жидкости h, скорости звука в паре a_s и безразмерного комплекса $\left(\lambda_v \dfrac{T_w - T_b}{a_f\rho_b i_b h}\right)$, на форму фазовой поверхности и скорость течения пара оказывает влияние комплекс

$$\eta = \frac{2i_b - c_p[\varsigma T_w + (2+\varsigma)T_b] - \varsigma_l c_{pl}(T_b - T_0)}{\varsigma_l c_{pl}(T_b - T_0)},$$

от которого зависят безразмерные величины $\tilde{x}_0, \tilde{u}_0$.

Следуя [9, 11], используем следующее значение для локального коэффициента теплоотдачи $\alpha(z)$ при пленочном кипении на вертикальной поверхности:

$$\lambda_v \frac{T_w - T_b}{x_b(z)} = \alpha(z)(T_w - T_{l\infty}),$$

где $T_w - T_{l\infty} = (T_w - T_b) + (T_b - T_{l\infty}) \equiv \Delta T_+ + \Delta T_-$, $T_{l\infty}$ – температура жидкости на входе в резервуар, ΔT_+ – перегрев пара, ΔT_- – недогрев жидкости до температуры кипения.

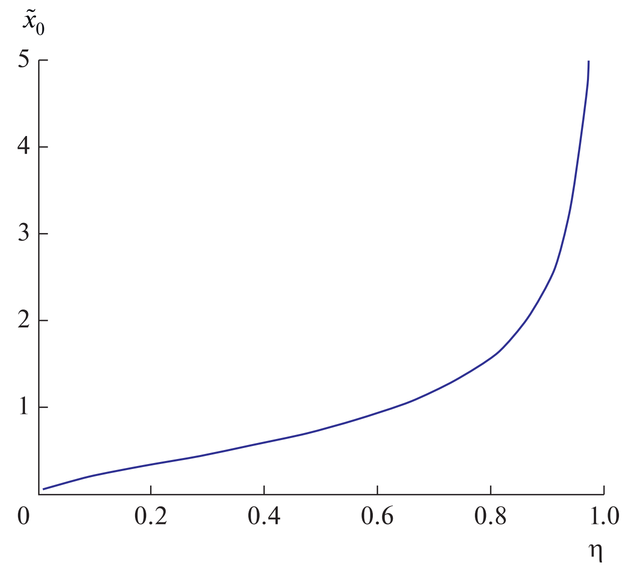


Рис. 2. Зависимость параметра $\tilde{x}_0$ от параметра η.

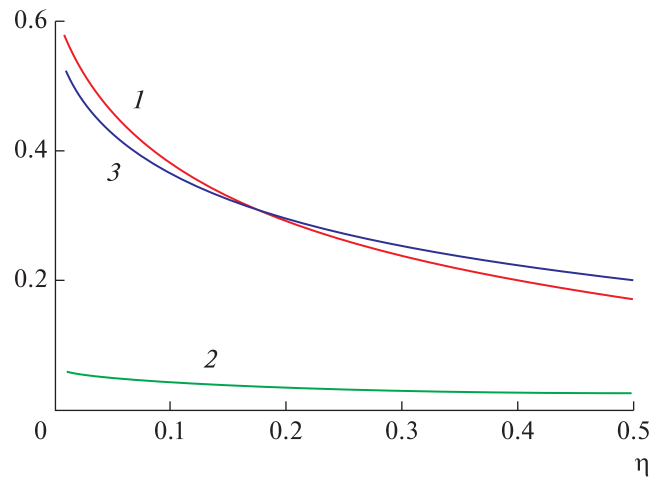


Рис. 3. Зависимость от параметра η параметра $\tilde{u}_0/\Lambda_0$ (*1*) и уходящего потока пара $G_-/(L_y h\rho_b a_s\varepsilon^{m+n})$ для двух значений Λ_0: *2* – 0.1, *3* – 0.9.

Теперь, используя уравнение (29), можно рассчитать среднее по высоте фазовой поверхности значение числа Нуссельта

$$\langle \mathrm{Nu} \rangle \equiv \frac{T_w - T_b}{\Delta T_+ + \Delta T_-} \int_0^h \frac{1}{\varepsilon^n \sqrt{z^2 + x_0^2}} dz =$$
$$= \varepsilon^{-n} \frac{T_w - T_b}{\Delta T_+ + \Delta T_-} \ln\left(\frac{1 + \sqrt{1 + \tilde{x}_0^2}}{1 + \tilde{x}_0} \right).$$

Для кипения воды при атмосферном давлении и температурах $T_b = 373$ K, $T_w = 383$ K осредненное значение числа Нуссельта при пленочном кипении на вертикальной поверхности может быть представлено в виде

$$\langle \mathrm{Nu} \rangle = \left[\frac{a_s \rho_b i_b h}{\lambda_v (T_w - T_b)} \right]^{3/10} \times$$
$$\times \left(\frac{T_w - T_b}{\Delta T_+ + \Delta T_-} \right) \ln\left(\frac{1 + \sqrt{1 + \tilde{x}_0^2}}{1 + \tilde{x}_0} \right).$$

Однако, как это будет показано далее, при пленочном кипении на вертикальной поверхности локальный коэффициент теплоотдачи при колебании пленки зависит и от времени $\alpha(z,t)$ и его необходимо осреднять и по высоте пленки, и по времени. Особенностью данного процесса является постоянное истечение пара в окружающую среду и представление о том, что толщина паровой пленки состоит из стационарной части и волн, распространяющихся по фазовой поверхности. В стационарном анализе исследован специальный режим, для которого методом многомасштабных асимптотических разложений построены решения гидродинамических уравнений, найдена форма фазовой границы, которая отделяет пар, примыкающий к горячей вертикальной стенке, от холодной жидкости. Найденное решение позволяет рассчитать характеристики теплообмена.

УСТОЙЧИВОСТЬ СТАЦИОНАРНОЙ ЗАДАЧИ ОТНОСИТЕЛЬНО МАЛЫХ И КОНЕЧНЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ

Проведем теперь краткий анализ устойчивости полученных выше стационарных решений о течениях пара и жидкости, находящихся по разные стороны от фазовой границы $x_b(z,t) = \tilde{x}(\tilde{z}) + \delta\tilde{x}(\tilde{z},t)$, $\tilde{x}(\tilde{z}) = \sqrt{\tilde{z}^2 + \tilde{x}_0^2}$, и устойчивости самой плоской границы.

Необходимость анализа устойчивости стационарного режима подтверждается примером последующих исследований задачи П.Л. Капицы [4, 5]. Многочисленные эксперименты по стекающим по наклонным стенкам слоям жидкости свидетельствуют о том, что в зависимости от организации течения (эксперимента) имеют место волновые режимы разной природы (см. работы [5, 7, 19–26] и библиографию к ним). Аналогичная картина наблюдается в экспериментах с горизонтальными паровыми пленками и пленками на поверхности нагретых сфер, опускаемых в холодную жидкость [27, 28], и горизонтальных трубах [23–26]. Достаточно подробный анализ колебаний паровой пленки на горизонтальной трубке с использованием лазерной диагностики получен в работе [26]. Однако несмотря на богатый экспериментальный материал, представленный в этих работах, трактовка механизма, приводящего к колебанию пленки пара, была неадекватной. В [26] сказано, что “при колебании границы раздела фаз одним из механизмов ... является нелинейная зависимость термического сопротивления от толщины парового слоя”. Зависимость термического сопротивления от толщины парового слоя не может приводить к колебаниям фазовой границы. Как показано в [27, 29–33] и подробно разбирается ниже применительно к рассматриваемой здесь задаче, причиной колебаний является механизм, связанный с зависимостью давления насыщения от температуры. Кроме того, в экспериментах [24–26] на колебания фазовой границы на горизонтальной трубке мог оказывать влияние отрыв паровых пузырей в верхней части трубы, аналогично тому, что наблюдается в [28].

Для рассматриваемой здесь задачи при анализе устойчивости полученного стационарного решения воспользуемся результатами работ [27, 29–33], посвященных анализу устойчивости режимов пленочного кипения. В этих работах проведены исследования устойчивости плоской, горизонтальной фазовой границы в поле сил тяжести при различных расположениях пара и тяжелой жидкости. Из-за стационарного потока теплоты $\mathbf{q}(\mathbf{r}) = -\lambda \nabla T(\mathbf{r}) \neq 0$ при искривлении границы раздела фаз, кроме гравитационно-капиллярных сил, оказывают влияние изменения потоков теплоты и массы, вызванные изменением толщины паровой пленки. Искривление и смещение фазовой поверхности приводит к изменению температуры кипения и, соответственно, давления насыщения, зависящего от температуры. Это явление аналогично известному эффекту Гиббса–Томсона: деформация фазовой поверхности приводит к изменению температуры кипения и давления насыщения. При больших тепловых потоках через фазовую поверхность вариации температуры кипения и давления насыщения вызывают возмущения, превышающие аналогичные эффекты, связанные с силой тяжести и поверхностным натяжением. В этих случаях именно вариации температуры кипения и давления насыщения приводят к генерации поверхностных волн, отличающихся от известных гравитационно-капиллярных волн. Фазовая скорость этих волн при интенсивных потоках теплоты может намного превышать скорость капиллярно-гравитационных волн и приводить к возникновению “ряби, не связанной с поверхностным натяжением”. Эти волны играют определяющую роль в волновых процессах на границе раздела жидкость–пар и проявляются, как отмечено в [5], при любой стратификации фаз.

При анализе устойчивости стационарного состояния пренебрежем изменением толщины стационарной пленки по высоте сосуда, т.е. стационарная толщина паровой пленки x_{sb} считается постоянной:

$$x_{sb} = (\min|x_b(z,t)(z,t)| + \min|x_b(z,t)(z,t)|)/2 = \\ = \text{const}, \quad (36)$$

а суммарная толщина нестационарной пленки представляется в виде

$$x_b(z,t) = \varepsilon^n \sqrt{z^2 + x_0^2} + \delta x(z,t), \quad (37)$$

где

$$|\delta x| < x_{sb} = \\ = (\min|x_b(z,t)(z,t)| + \min|x_b(z,t)(z,t)|)/2. \quad (38)$$

Изменение толщины пленки по высоте сосуда можно искать в виде

$$\delta x(z,t) = \xi(t)\exp(ik_s z) = \xi(t)\sin(k_s z).$$

Волновое число k_s для возмущений, обращающихся в ноль при $z = 0$ и $z = L$, можно определить следующим образом:

$$k_s = \frac{\pi}{L} \approx \frac{\pi}{h}, \ldots,$$

так как $L = \int_0^h \sqrt{1 + \left(\varepsilon^n \dfrac{dx_b}{dz}\right)^2} dz \approx h$ – длина фазовой границы.

При таких условиях с учетом неравенства (38) для анализа устойчивости полученного выше стационарного решения (23) можно воспользоваться результатами работ [29, 30], где описан метод получения дифференциального уравнения для функции $\xi(t)$. В линейном приближении по $\xi(t)$ получается

$$\frac{d^2\xi}{dt^2} = -(k_s g_f + \sigma k_s^3/\rho_\Sigma)\xi. \quad (39)$$

Здесь $g_f = \left(\dfrac{\partial P}{\partial T}\right)_{b0} q_b/\lambda_v \rho_\Sigma = \left(\dfrac{\partial P}{\partial T}\right)_{b0} (T_w - T_b)/x_{sb}\rho_\Sigma$, q_b – приходящий на фазовую поверхность поток теплоты; $\rho_\Sigma = \rho_L + \rho_v$; σ – поверхностное натяжение.

Решая уравнение (39), для возмущений толщины пленки $\delta x(z,t)$, обращающихся в ноль при $z = h$ и $z = h$, получаем

$$\delta x(z,t) = a_1[\sin(k_s z + \omega_1 t) + \sin(k_s z - \omega_1 t)].$$

Здесь частота колебаний границы паровой пленки вычисляется как

$$\omega = [\operatorname{th}(kx_0)]^{1/2} \times \\ \times \left\{[kg_f + \sigma k^3/\rho_\Sigma + kg(\rho_L - \rho_v)/\rho_\Sigma]\right\}^{1/2}.$$

Данное выражение отличается от формулы

$$\omega = [\operatorname{th}(k_s x_0)]^{1/2}(k_s g_f + \sigma k_s^3/\rho_\Sigma)^{1/2} \approx \\ \approx (k_s x_0)^{1/2}(k_s g_f)^{1/2}.$$

из работы [30] тем, что на горизонтальное смещение паровой пленки в горизонтальном направлении сила тяжести не оказывает влияния.

С учетом характерных параметров задачи при условии $g_f > \sigma(k_{\min})^2/\rho_\Sigma$ можно пренебречь поверхностным натяжением. В этих случаях частоту колебаний границы пленки пара, находящейся на твердой горячей вертикальной поверхности, можно рассчитать по формуле

$$\omega_1 = \pm\left(\pi\varepsilon^2\sqrt{1 + \tilde{x}_0^2}\right)^{1/2} \sqrt{\frac{2\pi}{h}\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{b0} (T_w - T_b)/x_{sb}\rho_L}.$$

Отсюда видно, что волны, распространяющиеся вдоль вертикальной фазовой поверхности, аналогичны исследованным в работах [27, 29–33]. Эти волны, возникающие в неизотермических системах, принципиально отличаются от известных гравитационно-капиллярных волн в жидкости. Генерация таких волн возможна лишь при наличии потока теплоты $q_b = \lambda_s(T_w - T_b)/x_{sb} \neq 0$ и связана с зависимостью давления насыщения от температуры жидкости, искривлением фазовой границы и возникновением ускорения g_f, направленного перпендикулярно к вертикальной фазовой поверхности.

С учетом неравенства (38) и малой толщины стационарной паровой пленки (36) частота колебаний поверхности пленки для кипения воды при атмосферном давлении и перепадах температур $T_w - T \approx 100$ K лежит в пределах (10–100) Гц. Поэтому для наблюдения таких волн в экспериментах требуются прецизионные измерения.

В рамках линейной задачи (39) определить амплитуду поверхностной волны невозможно. Ее можно получить, учтя нелинейные эффекты [33], опущенные в (39). В работе [33] получено нелинейное уравнение, описывающее более медленное колебание, чем период колебания пленки пара.

С учетом нелинейных членов уравнение (39) имеет вид

Рис. 4. Формы фазовой поверхности, возникающей при опускании нагретой до 1500 K металлической сферы диаметром 20 мм в жидкий аргон [12]; время отсчитывается от момента опускания сферы в жидкость.

$$\frac{d^2\xi}{dt^2}+\left(\pi\varepsilon^2\sqrt{1+\tilde{x}_0^2}\right)^{1/2}(k_s g_f+\sigma k_s^3/\rho_L)\xi = \\ =\frac{d}{dt}\left[\frac{d\xi}{dt}(k_s\xi)^2\Big/2\right]-\frac{(k_s)^2}{2}\left(\frac{d\xi}{dt}\right)^2\xi. \quad (40)$$

Уравнение имеет свой малый параметр

$$\varepsilon_s=\sigma k_s^2/g_f\rho_L\approx\varepsilon<1, \quad (41)$$

и его удобно привести к безразмерному виду, вводя новые переменные

$$\varsigma=k_s\xi<1,\quad \tau=\left(\pi\varepsilon^2\sqrt{1+\tilde{x}_0^2}\right)^{1/2}(k_s\,g_f)^2t.$$

Решение линейного уравнения (40) с учетом (41) в безразмерной форме имеет простой вид $\varsigma(\tau)=a_0\exp(i\tau)$. Однако нелинейные эффекты в (40) приводят к медленному ($\tau_s=\varepsilon_s\tau$) по сравнению с периодом линейной волны изменению амплитуды поверхностной волны $a_0(\tau_s=\varepsilon_s\tau)$. Решение нелинейного уравнения (40) может быть построено в виде ряда по малому параметру $a_0<1$ [34]:

$$\varsigma(\tau)=a_0(\tau_s)\exp(i\tau)+a_0^2\exp(i2\tau)+a_0^3\exp(i3\tau)+\ldots.$$

С использованием метода, предложенного в [34], можно найти амплитуду волны

$$a_0=\sqrt{\varepsilon_s/2}. \quad (42)$$

Для кипения воды при атмосферном давлении и $T_b=373$ K, $T_w=383$ K, где $\Lambda=4\times10^{-5}$, с учетом (27) и $n=3/2$ амплитуда волны в размерном виде:

$$a_0=\pi^2h\left(\lambda_v\frac{T_w-T_b}{a_s\rho_b i_b h}\right)^{3/10}\sqrt{2\sigma/h^2g_f\rho_L}.$$

Из (42) следует, что результаты [33], полученные для горизонтальной паровой пленки, можно использовать и для паровой пленки на вертикальной поверхности. Параметры, входящие в (42), зависят от состояния стационарной паровой пленки, но, согласно (37), не учитывают изменения толщины паровой пленки по высоте (длине), как в [33]. В [33] показано, что нелинейные эффекты, связанные с изменением толщины паровой пленки, могут также приводить к периодически повторяющемуся взрывному разрушению паровой пленки и выбросу пузырьков пара в жидкость. В таких режимах за конечное время происходит взрывное разрушение паровой пленки и жидкость приближается к горячей поверхности на очень малое расстояние. Происходит интенсивное испарение и восстановление – паровая пленка на вертикальной поверхности существует в режиме периодического разрушения и восстановления.

Эксперименты, проводимые при опускании раскаленной металлической сферы в недогретую до кипения жидкость, явно демонстрируют колебания фазовой границы пар–жидкость [27, 28]. На рис. 4 показано изменение во времени формы фазовой поверхности жидкость–пар, возникающей при опускании нагретой до 1500 K металлической сферы диаметром 20 мм в жидкий аргон [28]. Эти результаты аналогичны колебаниям, возникающим при опускании нагретой металлической полусферы в воду [27]. Однако детальных экспериментальных измерений характеристик волн на плоских, вертикальных нагретых до высоких температур металлических поверхностях автору не известно.

Характеристики волновых течений на вертикальной фазовой поверхности, полученные здесь, существенно отличаются от волновых явлений, рассмотренных в работах [1, 4, 5, 7, 9, 10, 23–26]. Это связано с тем, что основным механизмом является не сила тяжести, а зависимость давления насыщения $P_b(T_b)$ от температуры и искривление фазовой поверхности, приводящее к изменению температуры кипения T_b.

Качественный и количественный анализ данных, полученных в [9–15, 18–26], позволяет предположить, что явления, наблюдавшиеся в ряде экспериментов по пленочному кипению, могут быть связаны с образованием и распространением специфических нелинейных волн – солитонов, их последующим разрушением и выбросом пузырьков пара в жидкость. Судя по осциллограммам колебаний паровой пленки, приведенным в работе [35], эти режимы пленочного кипения подобны волновой турбулентности, развитой В.Е. Захаровым для гидродинамических волн [35].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследован частный режим стационарного пленочного кипения на плоской вертикальной поверхности. Особенностью данного процесса является постоянное истечение пара в окружающую среду и представление о том, что толщина паровой пленки состоит из стационарной части и волн, распространяющихся по фазовой поверхности. В стационарном анализе исследован специальный режим, для которого методом многомасштабных асимптотических разложений построены решения гидродинамических уравнений и найдена форма фазовой границы для слоя конечной толщины h. Изменяющаяся по высоте бассейна фазовая граница $x_b(z)$, $0 \le z \le h$, отделяет находящийся на вертикальной стенке пар от недогретой до кипения жидкости, заполняющей остальную часть открытого сверху прямоугольного сосуда. Решение плоской задачи в декартовой системе координат, построенное методом многомасштабных асимптотических разложений, позволяет рассчитать характеристики теплообмена, включая средние значения коэффициента теплоотдачи и числа Нуссельта.

Исследована устойчивость полученной стационарной конфигурации границы пар–жидкость и показано, что вдоль границы распространяются волны, которые аналогичны волнам, исследованным в работах [29–33]. Найдено решение нелинейной задачи о колебании фазовой поверхности, и определена амплитуда распространяющейся волны. Волны, возникающие в неизотермических системах, к которым относятся поверхности фазового перехода жидкость–пар, отличаются от известных гравитационно-капиллярных волн в жидкости. Генерация этих поверхностных волн связана с изменением температуры кипения, возникающим при искривлении и смещении фазовой поверхности, и зависимостью давления насыщения от температуры. Изменение температуры кипения при искривлении или смещении фазовой поверхности, по существу, есть эффект Гиббса–Томсона – влияние деформации фазовой поверхности на изменение температуры фазового перехода.

Полученное решение позволяет рассчитать характеристики теплообмена при пленочном режиме кипения на плоской вертикальной поверхности.

Автор благодарит Ю.П. Ивочкина и В.В. Глазкова за полезные обсуждения данной работы.

Работа посвящается памяти П.Л. Капицы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Капица П.Л.* Волновое течение тонких слоев вязкой жидкости. I. Свободное течение // ЖЭТФ. 1949. Т. 18. С. 3.
2. *Капица П.Л.* Волновое течение тонких слоев вязкой жидкости. II. Течение в соприкосновении с потоком газа и теплопередача // ЖЭТФ. 1949. Т. 18. С. 19.
3. *Капица П.Л., Капица С.П.* Волновое течение тонких слоев вязкой жидкости. II. Течение в соприкосновении с потоком газа и теплопередача // ЖЭТФ. 1949. Т. 19. С. 105.
4. *Шкадов В.Я.* Волновые течения тонкого слоя вязкой жидкости под действием силы тяжести // Изв. РАН. Механика жидкости и газа. 1967. № 1. С. 43.
5. *Накоряков В.Е., Покусаев В.Г., Шрейбер И.Р.* Волновая динамика в газо- и парожидкостных средах. М.: Энергоатомиздат, 1990. 248 с.
6. *Nuselt W.* Die Oberflächenkondensation des Wasserdampfes. Teil 1, 2 // Zeitschrift der VDI. 1916. Bd. 60. № 27, 28. S. 541, 569.
7. *Кутателадзе С.С., Накоряков В.Е.* Тепломассообмен и волны в газожидкостных средах. Новосибирск: Наука, 1984. 301 с.
8. *Лабунцов Д.А., Ягов В.В.* Механика двухфазных систем. М.: Изд-во МЭИ, 2016. 373 с.
9. *Bromley L.A.* Heat Transfer in Stable Film Boiling. Radiation Laboratory, University of California, 1948.
10. *Hsu Y.Y.* A Review on Film Boiling. Technical Paper Proposed for Presentation at Cryogenic Engineering Conference Boulder. Colorado, June 17–19, 1970. NASA TM X-52837. 1970. 45 p.
11. *Dhir V.K., Purohit G.P.* Subcooled Film-boiling Heat Transfer from Spheres // Nuclear Engineering and Design. 1978. V. 47. P. 49.
12. *Боришанский В.М., Фокин Б.С.* Обобщение данных по теплообмену при устойчивом пленочном кипении на вертикальных поверхностях // ИФЖ. 1965. С. 290.
13. *Sarma P.K., Sharma K.V.* Turbulent Film Boiling from a Vertical Non-isothermal Surface // Wärme- und Stoffübertragung. 1990. V. 25. P. 93.
14. *Синкевич О.А.* Волны и неустойчивости в сплошных средах. М.: Изд-во МЭИ, 2016. 263 с.
15. *Кутателадзе С.С.* Гидромеханическая модель кризиса теплообмена в кипящей жидкости при свободной конвекции // ЖТФ. 1950. Т. 20. № 11. С. 1389.
16. *Найфе А.Х.* Методы возмущений. Перев. с англ. Под ред. Ф.Л. Черноусько. М.: Мир, 1976. 455 с.
17. *Джозеф Д.* Устойчивость движений жидкости. Перев. с англ. Под ред. Г.И. Петрова. М.: Мир, 1983. 638 с.
18. *Vinogradov D.A., Ivochkin Y.P., Kubrikov K.G., Sinkevich O.A., Teplyakov I.O.* Study of the Features of Behavior of Overheated Liquid-metal Drops in Gas Media, Water, and Electromagnetic Field of the Inductor // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. V. 1359. 012037.

19. *Chang Y.P.* Wave Theory of Heat Transfer in Film Boiling // Trans. ASME J. Heat Transfer. 1959. V. 81. Iss. 1. P. 1.
20. *Berenson P.J.* Film Boiling Heat Transfer from a Horizontal Surface // J. Heat Transfer. 1961. V. 83. Ser. C. P. 351.
21. *Zuber N.* On the Stability of Boiling Heat Transfer // Trans. ASME. 1958. V. 80. P. 711.
22. *Abbass I.A., Winterton R.H.S.* The Non-boiling Vapour Film // Int. J. Hear Mass Transfer. 1989. V. 32. № 9. P. 1649.
23. *Грановский В.С., Хабенский В.Б.* Пленочное кипение на вертикальной поверхности в большом объеме на недогретой жидкости // ТВТ. 1987. Т. 25. № 5. С. 950.
24. *Petukhov B.S., Kovalev A.K., Zukov V.M., Kuzma-Kichta Yu.A.* Investigation of a Mechanism of Heat Transfer and Film Boiling of Liquid // Proc. 5th Int. Heat Trunsfer Conf. Tokio. 1974. V. 4. P. 96.
25. *Нигматулин Б.И., Кузма-Кичта Ю.А., Булкина Н.А., Устинов А.К., Молошников А.Ц., Рыхлик В.С.* Исследование колебаний границы раздела фаз и механизма переноса тепла при пленочном кипении // ТВТ. 1994. Т. 32. № 2. С. 255.
26. *Meduri P.K., Warrier G.R., Dhir V.K.* Wall Heat Flux Partitioning during Aubcooled Forced Flow Film Boiling of Water on a Vertical Surface // Int. J. Heat Mass Transfer. 2009. V. 52. P. 3534.
27. *Глазков В.В., Жилин В.Г., Зейгарник Ю.А., Ивочкин Ю.П., Игумнов В.С., Синкевич О.А., Цой В.Р., Швец В.Г.* Исследование развития неустойчивости и разрушения парового слоя на твердой нагретой полусферической поверхности // ТВТ. 2000. Т. 38. № 6. С. 935.
28. *Кузма-Кичта Ю.А., Молошников А.Ц., Нигматулин Б.И., Устинов А.К.* Исследование колебаний границы раздела фаз и механизма переноса тепла при пленочном кипении. Часть 2 // ТВТ. 1995. Т. 33. № 2. С. 273.
29. *Синкевич О.А.* Волны на поверхности кипящей жидкости при различных стратификациях сред // ЖЭТФ. 2015. Т. 148. Вып. 2(8). С. 169.
30. *Sinkevich O.A.* Waves on the Surface of Vapor Film under Conditions of Intensive Heat Fluxes // Phys. Rev. E. 2008. V. 78. 036318.
31. *Sinkevich O.A., Glazkov V.V., Ivochkin Yu.P., Kireeva A.N.* Vapor Films under Influence of High Heat Fluxes: Nongravity Surface Waves and Film Explosive Disintegration // Int. J. Nonlinear Sci. Numer. Simul. 2013. V. 14. № 1. P. 1.
32. *Синкевич О.А.* Нелинейные колебания паровой пленки при интенсивных тепловых потоках // Изв. РАН. Механика жидкости и газа. 2010. № 5. С. 66.
33. *Синкевич О.А.* Взрывное разрушение паровой пленки при интенсивных тепловых потоках // ТВТ. 2007. Т. 45. № 2. С. 243.
34. *Боголюбов Н.Н., Митропольский Ю.А.* Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний. М.: Изд-во физ.-мат. лит., 1963. 410 с.
35. *Захаров В.Е., Кузнецов Е.А.* Солитоны и коллапсы: два сценария эволюции нелинейных волновых си|-стем // УФН. 2012. Т. 182. № 6. С. 569.

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР, 2021, том 59, № 1, с. 100–108

УДК 533.526:536.24

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ КОЛЕБАНИЙ СФЕРИЧЕСКИ ЗАТУПЛЕННОГО КОНУСА ПРИ ОБТЕКАНИИ СВЕРХЗВУКОВЫМ ПОТОКОМ ВОЗДУХА НА ХАРАКТЕРИСТИКИ СОПРЯЖЕННОГО ТЕПЛОМАССООБМЕНА

© 2021 г. К. Н. Ефимов[1], В. А. Овчинников[1], А. С. Якимов[1, *]

[1]*Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия*

**E-mail: yakimovas@mail.ru*

Поступила в редакцию 06.11.2019 г.
После доработки 15.05.2020 г.
Принята к публикации 14.10.2020 г.

Работа посвящена изучению воздействия флуктуаций тела, обтекаемого сверхзвуковым потоком воздуха, на сопряженный тепломассообмен в теплозащитном материале при наличии вдува продуктов термохимического разрушения и тепломассообмена между телом и набегающим потоком. Представлены результаты численного исследования пространственного сверхзвукового потока около сферически затупленного конуса, совершающего колебательное движение в плоскости тангажа. Рассматривается влияние колебаний тела с угловой скоростью в диапазоне 0–100 градус/с на температуру поверхности и теплообменные характеристики.

DOI: 10.31857/S0040364420060071

ВВЕДЕНИЕ

Летательные аппараты при движении с гиперзвуковыми скоростями в плотных слоях атмосферы Земли подвергаются сильному тепловому воздействию, приводящему к изменению их формы и аэродинамических характеристик. Колебательные движения меняют условия обтекания и тепловое состояние тела по сравнению со случаем его отсутствия. Ранее, например в работах [1, 2], были проведены исследования влияния переменных углов атаки на аэродинамические характеристики обтекаемых осесимметричных тел. В связи с этим интересно проанализировать влияние таких колебательных движений на тепловое состояние тела при взаимодействии с высокоэнтальпийными потоками. При обтекании тела с постоянным углом атаки [3, 4] разница тепловых потоков на подветренной и наветренной сторонах может быть очень значительной, что приводит к неравномерному нагреву. Для уменьшения этого эффекта сверхзвуковым летательным аппаратам могут придавать вращательные и колебательные движения. Взаимосвязанный характер протекания тепловых и аэродинамических процессов приводит к необходимости при математическом моделировании решать задачу в сопряженной постановке [5]. В публикациях [6–8] проведено исследование влияния вращения тела вокруг оси на характеристики сопряженного тепломассопереноса при пространственном сверхзвуковом обтекании.

В настоящей работе движение газового потока описывается уравнениями пограничного слоя с учетом ламинарного и турбулентного режимов течения. Для описания теплового состояния тела выписывается система уравнений сохранения для пористой среды. Учитываются различные процессы разрушения на конической части поверхности обтекаемого тела и фильтрация охлаждающего газа в порах на сферическом затуплении. Задача решается в сопряженной постановке [5, 9], так как это позволяет существенно повысить точность определения аэродинамических и тепловых характеристик по сравнению с раздельными оценками аэродинамики, термохимического разрушения, параметров движения тела.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В работах [5, 9] проведены оценки времен релаксации в газовой и конденсированной фазах. На основании этих оценок характеристики сопряженного тепломассообмена находятся из решения квазистационарных уравнений пространственного пограничного слоя при различных режимах течения. Тепловое состояние пористой оболочки определяется из решения нестационарного уравнения сохранения энергии для пористого сферического затупления и квазистационарного уравнения для скорости фильтрации охлаждающего газа в порах в рамках однотемпературной модели.

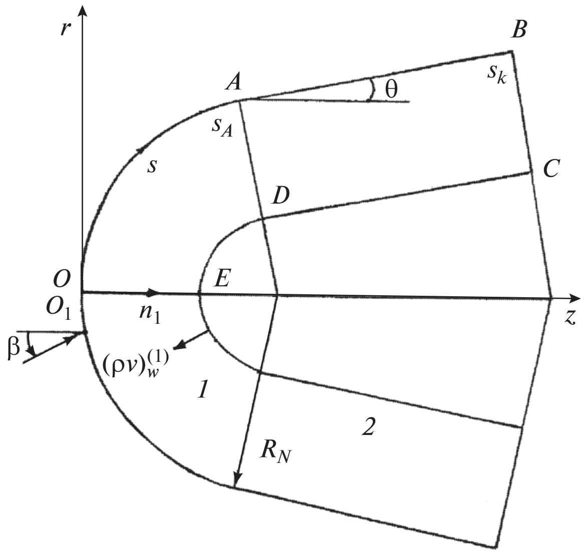


Рис. 1. Схема обтекания тела: *1* – пористое сферическое затупление, *2* – коническая часть тела из углепластика или графита.

Для модели химически равновесного воздуха по гипотезе "пассивности" и равенства единице чисел Льюиса для всех компонентов система уравнений пространственного пограничного слоя в естественной системе координат, связанной с внешней поверхностью обтекаемой оболочки, имеет вид [3, 8] (рис. 1)

$$\frac{\partial}{\partial s}(\rho u r_w)+\frac{\partial}{\partial n}(\rho v r_w)+\frac{\partial}{\partial \eta}(\rho w)=0, \tag{1}$$

$$\rho\left(u\frac{\partial u}{\partial s}+v\frac{\partial u}{\partial n}+\frac{w}{r_w}\frac{\partial u}{\partial \eta}-\frac{w^2}{r_w}\frac{\partial r_w}{\partial s}\right)= -\frac{\partial P_e}{\partial s}+\frac{\partial}{\partial n}\left(\mu_\Sigma\frac{\partial u}{\partial n}\right), \tag{2}$$

$$\rho\left(u\frac{\partial w}{\partial s}+v\frac{\partial w}{\partial n}+\frac{w}{r_w}\frac{\partial w}{\partial \eta}+\frac{uw}{r_w}\frac{\partial r_w}{\partial s}\right)= -\frac{1}{r_w}\frac{\partial P_e}{\partial \eta}+\frac{\partial}{\partial n}\left(\mu_\Sigma\frac{\partial w}{\partial n}\right), \tag{3}$$

$$\rho\left(u\frac{\partial H}{\partial s}+v\frac{\partial H}{\partial n}+\frac{w}{r_w}\frac{\partial H}{\partial \eta}\right)= \frac{\partial}{\partial n}\left\{\frac{\mu_\Sigma}{\mathrm{Pr}_\Sigma}\left[\frac{\partial H}{\partial n}+(\mathrm{Pr}_\Sigma-1)\frac{\partial}{\partial n}\left(\frac{u^2+w^2}{2}\right)\right]\right\}, \tag{4}$$

$$P=\rho h(\gamma_{\mathrm{ef}}-1)/\gamma_{\mathrm{ef}},\quad P=P_e(s,\eta),\quad H=h+(u^2+w^2)/2, \tag{5}$$

$$\mu_\Sigma=\mu+\Gamma\mu_T,\quad \mathrm{Pr}_\Sigma=\frac{(\mu+\Gamma\mu_T)\,\mathrm{Pr}\,\mathrm{Pr}_T}{\mu\,\mathrm{Pr}_T+\Gamma\mu_T\,\mathrm{Pr}}.$$

Для пористой сферической оболочки ($0<s<s_A$) при одномерности процесса фильтрации вдуваемого газа в направлении нормали к поверхности в рассматриваемой системе координат, связанной с осью симметрии тела, имеем [9, 10] при $0\le\eta<2\pi$

$$\frac{\partial(\rho_2\varphi v r_1 H_1)}{\partial n_1}=0, \tag{6}$$

$$(\rho c_p)_1(1-\varphi)\frac{\partial T_1}{\partial t}=\frac{1}{r_1H_1}\left\{\frac{\partial}{\partial n_1}\left[r_1H_1\lambda_1(1-\varphi)\frac{\partial T_1}{\partial n_1}\right]+\frac{\partial}{\partial s}\left[\frac{r_1\lambda_1}{H_1}(1-\varphi)\frac{\partial T_1}{\partial s}\right]+\frac{\partial}{\partial \eta}\left[\frac{H_1\lambda_1}{r_1}(1-\varphi)\frac{\partial T_1}{\partial \eta}\right]\right\}+ c_{p2}(\rho v)_w^{(1)}\frac{r_{1w}}{r_1H_1}\frac{\partial T_1}{\partial n_1}, \tag{7}$$

$$A\mu v+B\rho_2\varphi v|v|=-\frac{\partial P}{\partial n_1}, \tag{8}$$

$$P=\frac{\rho_2 R T_1}{M},\quad H_1=\frac{R_N-n_1}{R_N},\quad \bar s=\frac{s}{R_N},\quad r_1=(R_N-n_1)\sin(\bar s),\quad \mu\sim\sqrt{T_1},\quad \lambda_1\sim\sqrt{T_1},\quad \varphi=\mathrm{const}. \tag{9}$$

Для конической части тела ($s_A<s<s_k$) уравнения сохранения энергии и массы в подвижной системе координат записываются по математическим моделям [6, 10] при $0\le\eta<2\pi$

$$\rho_c c_p\left(\frac{\partial T}{\partial t}-\psi\frac{\partial T}{\partial n_1}\right)+c_{p2}G\frac{\partial T}{\partial n_1}=\frac{\partial}{\partial n_1}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial n_1}\right)+\frac{\partial}{\partial s}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial s}\right)+\frac{1}{r_2^2}\frac{\partial}{\partial \eta}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial \eta}\right)-Q_c\frac{d\rho_c}{dt}, \tag{10}$$

$$\frac{d\rho_c}{dt}=\left(\frac{\partial\rho_c}{\partial t}-\psi\frac{\partial \rho_c}{\partial n_1}\right)=\begin{cases}-k_c\rho_{c0}\left(\dfrac{\rho_c-\rho_{c*}}{\rho_{c0}}\right)\exp\left(-\dfrac{E_c}{RT}\right), & \rho_c>\rho_{c*},\\ 0, & \rho_c\le\rho_{c*},\end{cases} \tag{11}$$

$$G=\int_0^{l_1}\frac{d\rho_c}{dt}dn_1,\quad r_2=(R_N-n_1)\cos\theta+(s-s_A)\sin\theta,$$

$$l=L-x(t),\quad x(t)=\int_0^t\psi d\tau,\quad (\rho v)_{1w}=G_w,$$

$$(\rho v)_w^{(2)}=(\rho v)_{1w}+(\rho v)_{2w}+(\rho v)_{3w},\quad \psi=\sum_{i=2}^{3}\frac{(\rho v)_{iw}}{\rho_{cw}}. \tag{12}$$

В отличие от работ [6–8] в данной статье рассматриваются периодические колебания угла атаки в плоскости тангажа. Это движение описывается выражением

$$\beta(t)=\begin{cases}\beta_m-|\omega_f t-\beta_m|-(i-1)B_f,\\ (i-1)B_f\le t<B_f\,i/2,\\ |\omega_f t-3\beta_m|-\beta_m-B_f\,i/2,\\ B_f\,i/2\le t<B_f i.\end{cases} \tag{13}$$

В формуле (13) t – длительность процесса, $i = 1, 2...$, $B_f = 4\beta_m/\omega_f$ – период флуктуации, ω_f – угловая скорость изменения угла атаки β, β_m – максимальный угол атаки.

Вводятся следующие допущения: 1) характерная линейная скорость колебания тела много меньше скорости набегающего потока: $\Omega_f = \omega_f R_N/V_\infty \ll 1$; 2) характерное время колебательного процесса много больше времени релаксации газовой фазы ($t_\omega \gg t_a$, $t_\omega = 4\beta_m/\omega_f$, $t_a = R_N/V_\infty$). Это позволяет использовать уравнения пограничного слоя в квазистационарном виде.

Начальные условия:

$$T_1\big|_{t=0} = T\big|_{t=0} = T_0, \quad \rho_c\big|_{t=0} = \rho_{c0}. \tag{14}$$

Граничные условия в газовой фазе записываются следующим образом: на внешней границе пограничного слоя при $n \to \infty$

$$u \to u_e(s,\eta), \quad w \to w_e(s,\eta), \quad h \to h_e(s,\eta), \tag{15}$$

где u_e, w_e, h_e и P_e в (5) определяются из решения системы уравнений Эйлера [11];

на поверхности обтекаемого тела при $n = 0$

$$u(s,\eta) = 0, \quad w = 0, \quad v = v_w, \quad (0 < s < s_A). \tag{16}$$

На обтекаемой внешней поверхности оболочки ($n = n_1 = 0$) имеют место условия [6, 9] при $0 \le \eta < 2\pi$

$$\frac{\mu}{\Pr}\left(\frac{\partial h}{\partial n}\right)\bigg|_w - (1-\varphi)\varepsilon_1\sigma T_{1w}^4 = -\lambda_1(1-\varphi)\left(\frac{\partial T_1}{\partial n_1}\right)\bigg|_w, \quad 0 < s < s_A, \tag{17}$$

$$-\lambda\frac{\partial T}{\partial n_1}\bigg|_{n_1=0-x(t)} = \frac{\mu}{\Pr}\left(\frac{\partial h}{\partial n}\right)\bigg|_w - (h_w - h_c)\sum_{i=2}^{3}(\rho v)_{iw} - (\rho v)_{1w}(h_w - h_g) - \varepsilon\sigma T_w^4, \quad s_A \le s \le s_k. \tag{18}$$

На внутренней поверхности полусферы и конической части выписываются соотношения [9]:

$$-\lambda_1(1-\varphi)\frac{\partial T_1}{\partial n_1}\bigg|_{n_1=L} = \delta(T_{1,L} - T_0), \quad 0 < s < s_A, \tag{19}$$

$$\rho_c\big|_{n_1=l} = \rho_{c0}, \quad \lambda\frac{\partial T}{\partial n_1}\bigg|_{n_1=\ell} = 0, \quad s_A \le s \le s_k. \tag{20}$$

На кольце сопряжения сфера–конус $s = s_A$ используются условия идеального контакта, а при $s = s_k$ – адиабатическое условие

$$\frac{\lambda_1(1-\varphi)}{H_1}\frac{\partial T_1}{\partial s}\bigg|_{s=s_A-0} = \lambda\frac{\partial T}{\partial s}\bigg|_{s=s_A+0}, \quad T_1\big|_{s=s_A-0} = T\big|_{s=s_A+0}, \quad \frac{\partial T}{\partial s}\bigg|_{s=s_k} = 0. \tag{21}$$

На внешней и внутренней поверхностях области сферического затупления имеет место равенство давлений в порах и во внешней среде

$$P_w\big|_{n_1=0} = P_e(s,\eta), \quad P\big|_{n_1=L} = P_L. \tag{22}$$

При отсутствии плоскости симметрии течения имеют место условия периодичности

$$T_1(t,n_1,s,\eta) = T_1(t,n_1,s,\eta+2\pi), \quad T(t,n_1,s,\eta) = T(t,n_1,s,\eta+2\pi). \tag{23}$$

На границе раздела сред при $s \ge s_A$ рассматривалась следующая кинетическая схема протекания неравновесных химических реакций ($T_w \le 4000$ K) [9, 10, 12]:

$$\begin{gathered} \mathrm{C + O_2 \to CO_2, \quad 2C + O_2 \to 2CO,} \\ \mathrm{C + O \to CO, \quad C + CO_2 \to 2CO,} \\ \mathrm{2O + C \to O_2 + C, \quad 2N + C \to N_2 + C,} \\ \mathrm{C \leftrightarrow C_1, \quad C \leftrightarrow C_3.} \end{gathered} \tag{24}$$

Молярные и массовые скорости протекания данных химических реакций (24) и выражение для массовой скорости уноса подробно описаны в [5, 9], а формулы для $(\rho v)_{2w}$, $(\rho v)_{3w}$ из (12) имеют вид

$$\begin{gathered} (\rho v)_{2w} = \rho_w\left[\left(\frac{m_6}{m_2} - 1\right)c_{2w}B_1 + \left(2\frac{m_5}{m_2} - 1\right)c_{2w}B_2 + \left(\frac{m_5}{m_1} - 1\right)c_{1w}B_3 + \left(2\frac{m_5}{m_6} - 1\right)c_{6w}B_4\right], \\ (\rho v)_{3w} = \sum_{i=7}^{8}\frac{m_i A_{ci}(P_{ci}^* - P_{ci})}{(2\pi R T_w m_i)^{0.5}}, \quad i = 7,8, \\ P_{ci}^* = 10^5\exp(D_i - E_i/T_w), \\ B_i = k_{iw}\exp(-E_{iw}/RT_w), \quad i = \overline{1,4}, \\ P_{ci} = P_e c_{iw} m_w/m_i, \quad i = 7,8, \\ \rho_w = P_e m_w/(RT_w), \quad h_w = \sum_{i=1}^{8} h_i c_{iw}, \\ m_w^{-1} = \sum_{i=1}^{8} c_{iw}/m_i, \quad c_{p2} = b_1 + b_2 T, \quad h_g = \int_0^T c_{p2}\,dT. \end{gathered} \tag{25}$$

В (24), (25) порядковый номер компонентов соответствует следующему порядку их перечисления: O, O_2, N, N_2, CO, CO_2, C_1, C_3. C – обозначение твердофазного углерода, который принадлежит материалу теплозащитного покрытия. В пограничном слое имеются четыре компонента: O, O_2, N, N_2, которые участвуют в двух равновесных химических реакциях: $O_2 \leftrightarrow 2O$, $N_2 \leftrightarrow 2N$. На границе конденсированной и газовой фаз присутствуют четыре компонента: CO, CO_2, C_1, C_3, которые возникают в шести гетерогенных реакциях горения и сублимации из (24). Учитываются также две реакции каталитической рекомбинации компонентов O_2, N_2.

Балансовые соотношения для массовых концентраций компонент (c_{iw}) запишем, используя закон Фика для диффузионных потоков и аналогию процессов тепло- и массообмена [10]:

$$J_{iw} + (\rho v)_w^{(2)} c_{iw} = R_{iw}, \quad i = \overline{1,8},$$
$$J_{iw} = \gamma_i (c_{iw} - c_{ie}), \quad \gamma_i = \alpha / c_p,$$

где α/c_p и γ_i – коэффициенты теплообмена и массообмена соответственно. Считается, что продукты разрушения слабо разбавляют воздушную смесь в пограничном слое. Это позволяет использовать принятую выше постановку для уравнений в пограничном слое.

Здесь и ниже u, v, w – компоненты вектора среднемассовой скорости в естественной системе координат (s, n, η); Γ – коэффициент перемежаемости; H, m – полная энтальпия и молекулярная масса; R_N – радиус сферического затупления; r_w, r_i $(i = 1, 2)$, H_1 – коэффициенты Ламе; h и $(\rho v)_w^{(1)}$ – энтальпия и расход газа-охладителя с поверхности сферического затупления; ρ – плотность; μ – динамическая вязкость; P – давление; T – температура; $(\rho v)_w^{(2)}$ – полный массовый унос с углеродной поверхности конической части тела; A и B – вязкостный и инерционный коэффициенты в нелинейном законе Дарси (8); v – скорость фильтрации; φ – пористость сферического затупления; c_p – коэффициент теплоемкости при постоянном давлении; λ – коэффициент теплопроводности; R – универсальная газовая постоянная; M – молекулярная масса газа в пористой оболочке; L – толщина оболочки; θ – угол конусности; β – угол атаки; n_1 – нормаль к поверхности направлена в глубь оболочки; ψ – линейная скорость перемещения поверхности разрушения; $x(t)$ – граница раздела газообразной и конденсированной фаз (глубина выгорания); E_{iw}, k_{iw} $(i = 1, ..., 4)$ – энергия активации и предэкспонент i-й гетерогенной реакции оболочки конической части тела; k_c, E_c и Q_c – предэкспонент, энергия активации и тепловой эффект реакции пиролиза; H_∞, V_∞ – высота и скорость набегающего потока на бесконечности; σ – постоянная Стефана–Больцмана; ε – излучательная способность поверхности; G – массовый унос продуктов пиролиза углепластика; δ – коэффициент теплоотдачи на внутренней холодной поверхности сферической оболочки; Pr – число Прандтля.

Индексы e, $e0$ и w соответствуют величинам на внешней границе пограничного слоя, на внешней границе в точке торможения и на поверхности обтекаемого тела; (1), (2) внизу – характеристики каркаса и газа на сфере; g – газовая фаза на конической части поверхности; ∞ – величина набегающего газового потока на бесконечности; T, 0 – характеристика турбулентного переноса и начальные условия; L – внутренняя оболочка сферической части тела; k – периферийный участок оболочки; (1), (2) вверху – характеристики, связанные с расходом охладителя на пористой полусфере и поверхностные химические реакции на конической части тела; черта вверху – безразмерный параметр; z – время окончания теплового воздействия; ef – эффективная величина; m – максимальное значение; c – углепластик.

МЕТОД РАСЧЕТА И ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ

Система уравнений (1)–(4), (6)–(8), (10), (11) с начальными и граничными условиями (14)–(23) решена численно. Система уравнений пространственного пограничного слоя решалась в переменных типа Дородницына с учетом ламинарной, переходной и турбулентной областей течения. Для описания турбулентного течения применялась двухслойная модель турбулентного пограничного слоя [13, 14]. Рассматриваемая трехслойная алгебраическая модель турбулентности учитывает наличие ламинарного вязкого подслоя, внутренней области турбулентного ядра, которая описывается формулой Ван-Дрийста–Себечи [14], и внешней области, в которой используется формула Сполдинга [13]. Коэффициент перемежаемости и переход от ламинарного к турбулентному режиму течения описывался с помощью формулы Дхаваны–Нарасимхи [15]. При численном интегрировании Pr = 0.72, $\mathrm{Pr}_T = 1$. Для уравнений пограничного слоя с помощью итерационно-интерполяционного метода [16] были получены комбинированные разностные схемы, обеспечивающие сращивание искомых характеристик на границе ламинарного подслоя и турбулентного ядра и учитывающие характер изменения μ_T поперек пограничного слоя. Параметры методики [15], в том числе положение точек потери устойчивости ламинарного и перехода к турбулентному течению, подбирались исходя из экспериментальных данных [17, 18], которые также использовались для тестирования описанной модели пограничного слоя, показав ее хорошую работоспособность.

Численное решение трехмерных уравнений (7), (10) проводится методом расщепления [19]. Использована неявная, абсолютно устойчивая, монотонная разностная схема с суммарной погрешностью аппроксимации $O(\tau + H_{n_1}^2 + H_s^2 + H_\eta^2)$, где H_{n_1}, H_s, H_η – шаг по пространству вдоль координат n_1, s, η соответственно; τ – шаг по времени. Для проверки программы численного расчета в пористом теле использовалась последовательность сгущающихся сеток по пространству: $h_1 =$

$= h_{n_1} = 10^{-3}$ м, $h_2 = h_{s1} = 0.925 \times 10^{-2}$ (на сфере), $h_3 = h_{s2} = 10^{-2}$ (на конусе), $h_4 = h_\eta = 0.087$ и бралось $H_{1,i} = 2h_i$, $H_{2,i} = h_i$, $H_{3,i} = h_i/2$, $H_{4,i} = h_i/4$, $i = 1–4$. Температура каркаса фиксировалась по глубине тела в различные моменты времени. Во всех вариантах задача решалась с переменным шагом по времени, который выбирался из условия заданной точности, одинаковой для всех шагов по пространству. Различие относительной погрешности по температуре падало и к моменту времени $t = t_z$ составляло $\Delta_1 = 10.3\%$, $\Delta_2 = 6.5\%$, $\Delta_3 = 3.4\%$. Ниже результаты расчета получены для шагов по пространству $H_{3,i} = h_i/2$, $i = 1–4$.

Для тестирования процессов взаимодействия высокоэнтальпийных потоков воздуха с графитовыми поверхностями использовались результаты теоретических [20] и обобщенных экспериментальных исследований [21].

Квазистационарное уравнение неразрывности (6) $(\rho v)_w r_{1w}/(H_1 r_1) = -\rho_2\varphi v$ (знак минус обусловлен тем, что нормальная координата n_1 направлена в глубь тела (см. рис. 1), а охладитель течет в противоположном направлении) совместно с первым выражением (9), нелинейным законом Дарси (8) и граничными условиями (22) можно проинтегрировать и найти расход газа и давление в области *1* [9]:

$$(\rho v)_w(s,\eta) = \frac{\left[2B(P_L^2 - P_w^2)\varphi\, MD_L/R + E_L^2\right]^{0.5} - E_L}{2BD_L},$$

$$P(n_1,s,\eta) = \{P_w^2 + 2R(\rho v)_w[B(\rho v)_w D + E]/M\varphi\}^{0.5},$$

$$D(n_1,s,\eta) = \int_0^{n_1} T_1\left(\frac{r_{1w}}{r_1 H_1}\right)^2 dy,$$

$$E(n_1,s,\eta) = A\int_0^{n_1} \mu T_1 \frac{r_{1w}}{r_1 H_1} dy.$$

Давление на внутренней “холодной” поверхности пластины L задано в виде

$$P_L = kP_{e0},$$

где k – некоторая постоянная. Это обеспечивало необходимый расход охладителя (в частности, не была достигнута температура плавления каркаса из пористого металла [10, 22]) на участке теплового воздействия от $t = 0$ до $t = t_z$.

Расчеты обтекания конуса, затупленного по сфере, с углом полураствора $\theta = 15°$ потоком химически равновесного воздуха с переменным углом атаки $-\beta_m \le \beta \le \beta_m$, $\beta_m = 10°$ проводились для следующих условий [11], которые соответствуют параметрам: $H_\infty = 2.3 \times 10^4$ м, $V_\infty = 3000, 5000$ м/с, $R_N = 0.1$ м, $L_0 = 0.02$ м, $k = 2$. При данных параметрах задачи характерными являются время колебательного процесса $t_\omega = 0.4$ с, время релаксации газовой фазы $t_a = 3.3 \times 10^{-5}$ с, число Струхаля $\mathrm{St} = t_a/t_\omega = 8.25 \times 10^{-5}$. Кинетические константы (25) гетерогенных реакций (24) брались из [9], энтальпия графита h_c рассчитывалась по формуле [23]. Эффективный показатель адиабаты γ_{ef} в первой формуле (5) определялся согласно работе [11]. Для углеродного материала конической оболочки теплофизические коэффициенты известны из [9], для пористой стали – из [24]. Для графита конической части тела решается уравнение (10) при $Q_c = 0$, $G = 0$.

Приводимые ниже результаты получены при $h_{e0} = 4.7197 \times 10^6$ и 1.272×10^7 Дж/кг, $\varphi = 0.34$, $T_0 = 300$ К, $b_1 = 965.5$, $b_2 = 0.147$, $M = 29$ кг/кмоль, $\sigma = 5.67 \times 10^{-8}$ Вт/(м^2 К^4), $\varepsilon = 0.9$, $\rho_{c0} = 1400$ кг/м^3, $\rho_{c*} = 1300$ кг/м^3, $k_c = 3.15 \times 10^6$ с$^{-1}$, $E_c = 8.38 \times 10^4$ Дж/моль, $Q_c = 1.26 \times 10^6$ Дж/кг, $t_z = 40$ с. Теплофизические характеристики пористого затупления соответствовали пористой стали: $\varepsilon_1 = 0.8$, $\lambda_1 = 2.92 + 4.5 \times 10^{-3}T_1$ Вт/(м К), $\rho_1 c_{p1} = (1252 + 0.544T_1) \times 10^3$ Дж/(К м^3) [24], $A = 2.3 \times 10^{11}$ 1/м^2, $B = 5.7 \times 10^5$ 1/м. Теплофизические характеристики конической части тела отвечают углепластику [4, 9] или сплошному графиту ВПП [25].

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ И ИХ АНАЛИЗ

В дальнейшем результаты относятся к сечению $s/R_N = 5.0$, находящемуся на конической части тела. При таком выборе координаты сечения на подветренной части тела не наблюдались предотрывные состояния во все время процесса. В силу малых времен тепловой релаксации углепластика [7] для иллюстрации нестационарных тепловых процессов (рис. 2–7), возникающих вследствие колебательного движения и сильного аэродинамического нагрева, удобнее использовать графит. Тем не менее результаты на рис. 2–7 качественно отражают влияние колебаний на углепластик. Интегральные количественные сравнения графита с углепластиком представлены на рис. 8.

На рис. 2 показана временна́я зависимость температуры поверхности тела из графита при скорости набегающего потока $V_\infty = 5000$ м/с и фиксированном угле атаки $\beta = \beta_m = 10°$ ($\omega_f = 0$): кривые *1*–*2* и $\omega_f = 5$ градус/с (кривые *3*–*5*). В отсутствие колебательного процесса наблюдается монотонный рост температуры в точках $\eta = 180°$ (кривая *1*) и $\eta = 0°$ (кривая *2*). При наличии ос-

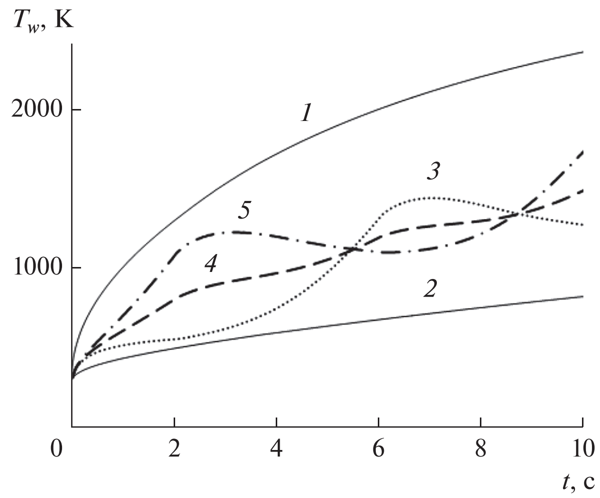


Рис. 2. Зависимость температуры поверхности графита в сечении $s/R_N = 5.0$ при $V_\infty = 5000$ м/с: *1*, *2* – $\omega_f = 0$ градус/с; *3*–*5* – 5.

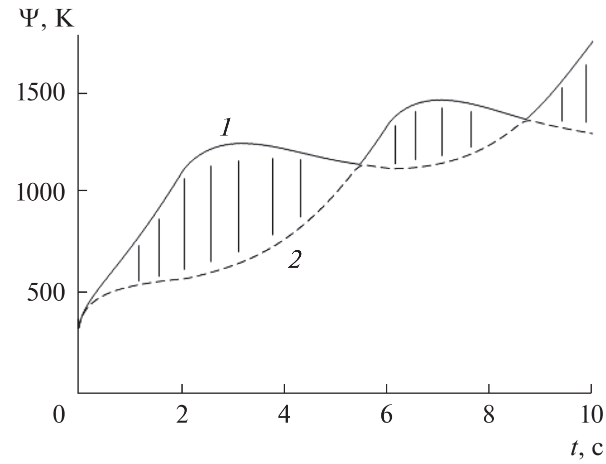


Рис. 4. Образующие семейства кривых $T_{w\eta}(t)$ при $V_\infty = 5000$ м/с и $\omega_f = 5$ градус/с для материала графита на конической части оболочки.

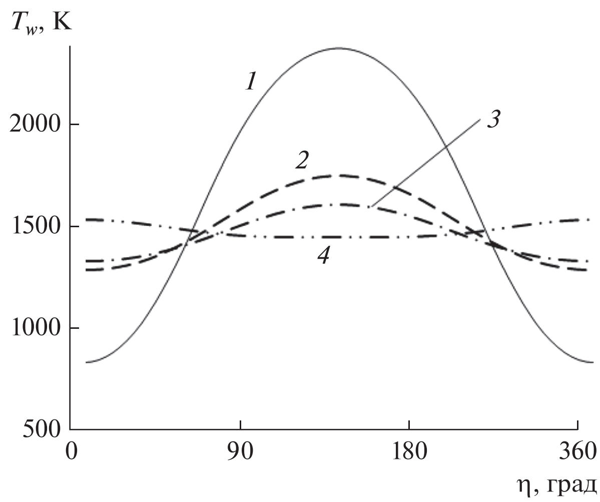


Рис. 3. Распределение температуры поверхности графита по окружной координаты при $V_\infty = 5000$ м/с: *1* – $\omega_f = 0$ градус/с, *2* – 5, *3* – 10, *4* – 100.

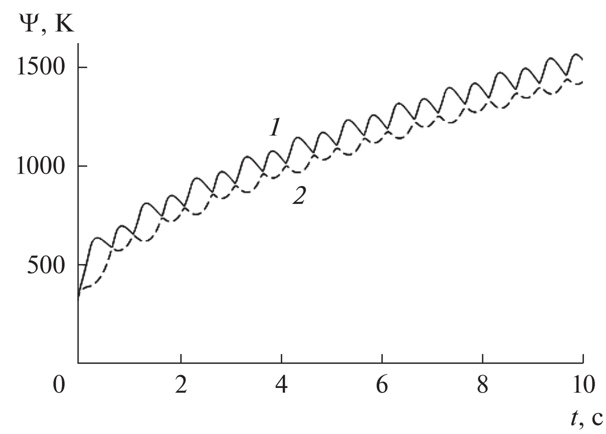


Рис. 5. Образующие семейства кривых $T_{w\eta}(t)$ при $V_\infty = 5000$ м/с и $\omega_f = 40$ градус/с для графита.

циллирующего движения (кривые *3*–*5*) происходит немонотонное изменение температуры поверхности в точках с координатами $\eta = 0, 90, 180°$, которым соответствуют кривые *3*–*5*. При этом происходит одновременное периодическое пересечение кривых *3*–*5* в определенные моменты времени. Как видно из рис. 2, колебательное движение приводит к снижению перепада температур с 1563 до 463 K при $t = 10$ с.

Это также может быть продемонстрировано посредством распределений температуры поверхности графита вдоль окружной координаты, показанным на рис. 3 для момента времени $t = 10$ с. Здесь кривым *1*–*4* соответствуют $\omega_f = 0, 5, 10,$ 100 градус/с. Из рис. 3 видно, что в этот момент времени $\eta = 180°$ соответствует наветренной стороне для кривых *1*–*3* и подветренной для кривой *4*. Максимальный перепад температуры в 1538 K на поверхности по окружной координате достигается в отсутствие осцилляций тела $\omega_f = 0$ градус/с (см. рис. 3, кривая *1*). С увеличением угловой скорости колебаний ω_f до 100 градус/с происходит снижение перепада температур до 83 K.

Рассмотрим 37 временны́х кривых $T_{w\eta}(t)$, описывающих изменение температур поверхности конической части из графита в точках $\eta = 0, 5, ..., 175, 180°$ исследуемого сечения s. Введем функции

$\Psi_{min}(t)$ и $\Psi_{max}(t)$, которые являются огибающими семейства 37 кривых $T_{w\eta}(t)$, полученных из решения сопряженной задачи, при фиксированных ω_f и s/R_N. На рис. 4 и 5 показаны зависимости $\Psi_{max}(t)$ (кривая *1*) и $\Psi_{min}(t)$ (кривая *2*) для угловых скоростей колебаний тела $\omega_f = 5$ и 40 градус/с соответственно. Из рис. 4 и 5 видно, что в определенные моменты времени сплошные и штриховые кривые имеют точки соприкосновения друг с другом. Это означает, что поверхность в сечении s/R_N в эти моменты времени становится близкой к изотермической.

Как известно, при $\omega_f = 0$ температура поверхности постоянна вдоль окружной координаты η при нулевом угле атаки [3]. В случае колебательного движения температура приближается к постоянному значению через некоторый промежуток времени, после того как угол атаки β проходит через нулевое значение (см. рис. 6). Как видно из рис. 4–6, переход в локальный изотермический режим носит циклический характер и зависит от угловой скорости колебаний ω_f. Из результатов расчетов при $\omega_f = 40$ градус/с следует, что поверхность становится близкой к изотермической с нерегулярной цикличностью при различных углах атаки β_{iso}, представленных на рис. 7. Как видно из этого рисунка, значение $|\beta_{iso}|$ уменьшается с течением времени и на величину $|\beta_{iso}|$ влияет знак угла атаки. При $\beta < 0$ значение $|\beta_{iso}|$ меньше, чем при положительных углах атаки β. Максимальное время между изотермическими режимами наблюдается в начальные моменты времени и составляет 5.4 и 0.7 с для $\omega_f = 5$ и 40 градус/с соответственно (см. рис. 4 и 5). Причиной затянувшегося процесса перехода в изотермический режим по сравнению с последующими является сильный аэродинамический нагрев, действующий на тело в начальные моменты времени, который также определяет разницу в значениях $|\beta_{iso}|$ для положительных и отрицательных углов атаки в последующие моменты времени.

В целях более детального изучения влияния осцилляций тела на теплообмен в теплозащитном материале введем следующую величину:

$$I_w = \frac{1}{t_z - t_0}\int_0^t \left[\Psi_{max}(t) - \Psi_{min}(t)\right] dt.$$

Как видно из приведенной выше формулы, величина I_w численно равна площади области (заштрихованной на рис. 4) между образующими, ограничивающими решение задачи и характеризующими интегральный перепад температур на поверхности тела, отнесенной к промежутку времени полета. На рис. 8 показаны зависимости интегрального перепада температур поверхности те-

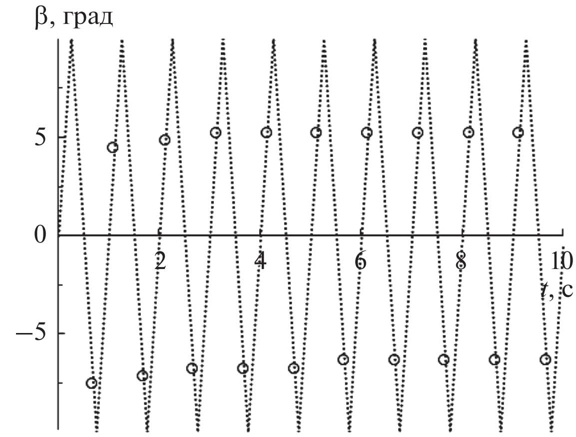


Рис. 6. Временнáя зависимость угла атаки: точки – моменты времени перехода в изотермический режим при $V_\infty = 5000$ м/с и $\omega_f = 40$ градус/с для графита.

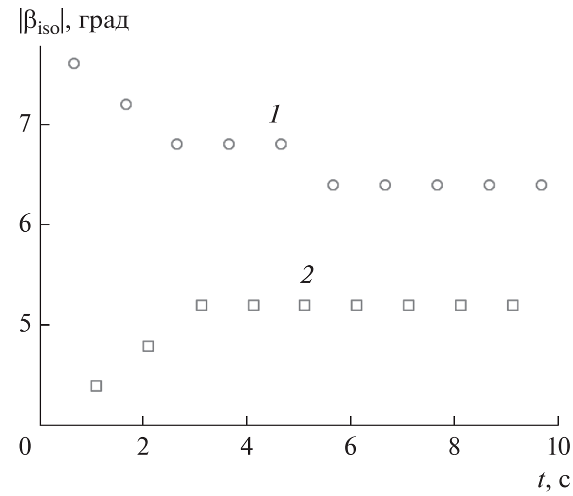


Рис. 7. Модуль угла атаки в моменты времени перехода в изотермический режим при $\omega_f = 40$ градус/с и $V_\infty = 5000$ м/с для графита: *1* – $\beta > 0$, *2* – $\beta < 0$.

ла от скорости колебаний в течение рассматриваемого промежутка времени от $t = t_0$ до $t = t_z$ для $V_\infty = 3000$ и 5000 м/с соответственно. Данные зависимости построены по результатам серии из 24 расчетов, соответствующих варьированию скорости набегающего потока $V_\infty = 3000$ и 5000 м/с, угловой скорости $\omega_f = 0$, 5, 10, 20, 40, 100 градус/с и материалов (углепластика и графита). Кривые *1* на рис. 8 соответствуют углепластику, кривые *2* – графиту. Как видно из рис. 8, даже при малых угловых скоростях колебаний ($\omega_f = 5$ градус/с) происходит сильное снижение перепада температур (для УП – на 58–67%, для графита – до 74–76%) по сравнению со случаем движения с постоянным углом атаки. Для достижения уровня перепа-

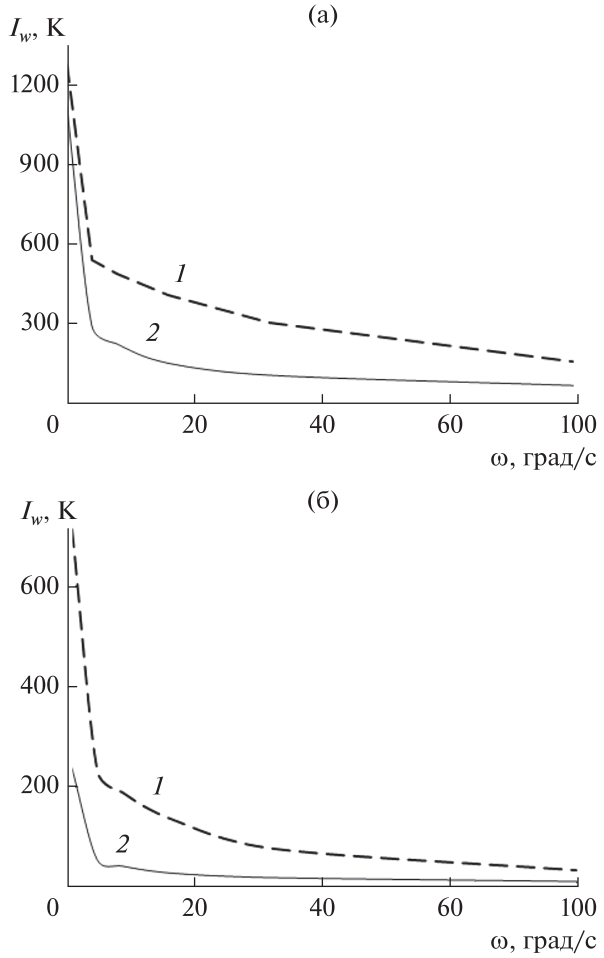


Рис. 8. Зависимость интегрального перепада температуры поверхности от угловой скорости колебаний тела при V_∞ = 5000 (а) и 3000 м/с (б).

да температур поверхности графита, например, I_w < 300 K при использовании углепластика в качестве теплозащитного материала требуется более высокая скорость колебаний тела ω_f = 40 градус/с, тогда как для графита достаточно ω_f = = 5 градус/с (см. рис. 8).

В результате при наличии осцилляций изменение формы тела вследствие линейного уноса материала с поверхности, обусловленного аэродинамическим нагревом, будет более равномерным (см. рис. 9). Кривые *1–3* на рис. 9 отвечают углепластику и ω_f = 0, 5, 40 градус/с. При наличии колебаний ω_f = 5–100 средние значения функций распределения глубины выгорания $x(\eta)$, представленных на рис. 9, по сравнению с ω_f = = 0 градус/с будут меньше на 18–19%. Максимальное отклонение функции $x(\eta)$ от своих средних значений 76% для ω_f = 0 уменьшается до 1.5%

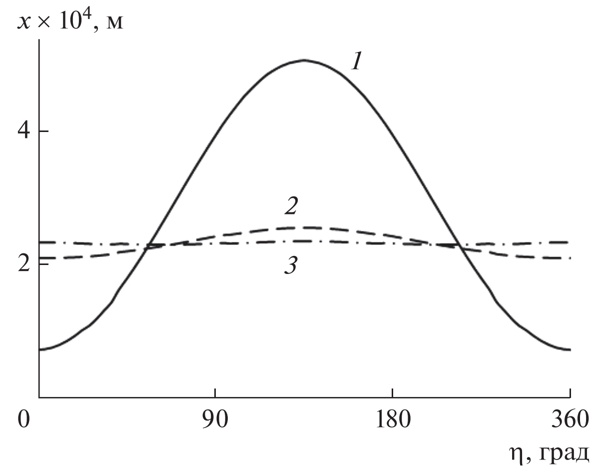


Рис. 9. Зависимость глубины выгорания материала от окружной координаты для углепластика при V_∞ = = 5000 м/с: *1* – ω_f = 0 градус/с, *2* – 5, *3* – 40.

для ω_f = 40 градус/с. Это говорит о том, что осцилляции в целом приводят к меньшему изменению формы летательного аппарата как в качественном, так и количественном отношении.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках сопряженной постановки задачи оценено интегральное влияние регулярного колебательного движения тела на перетекание тепла в теплозащитном покрытии. Показано, что даже при небольших значениях угловой скорости колебаний значительно уменьшается перепад температур (на 58–78% в зависимости от материала и условий обтекания) на поверхности тела. Показано, что изотермические режимы поверхности тела возникают с нерегулярной цикличностью. Скорость изменения угла атаки $\omega_f \geq 5$ градус/с приводит к более равномерному и меньшему (на 18–19%) изменению формы летательного аппарата по сравнению с движением с постоянным углом атаки. Тем самым обеспечивается лучшее сохранение аэродинамических характеристик летательного аппарата и меньший линейный унос теплозащитного материала.

Работа выполнена при поддержке фонда Д.И. Менделеева (грант № 8.2.15.2018).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Hoffman G.H., Plastzer M.F.* On Supersonic Flow Past Oscillating Bodies of Revolution // AIAA J. 1966. V. 4. № 2. P. 370.
2. *Telionis D., Gupta T.* Compressible Oscillating Boundary Layers // AIAA J. 1977. V. 15. № 7. P. 974.
3. *Зинченко В.И., Ефимов К.Н., Якимов А.С.* Исследование характеристик сопряженного тепло- и мас-

сообмена при вдуве газа и термохимическом разрушении обтекаемого тела // ТВТ. 2007. Т. 45. № 5. С. 749.

4. *Ефимов К.Н., Овчинников В.А., Якимов А.С., Гаар С.А.* Численный анализ характеристик теплообмена при радиационно-конвективном нагреве конуса, затупленного по сфере // ТВТ. 2019. Т. 57. № 1. С. 83.
5. *Гришин А.М., Фомин В.М.* Сопряженные и нестационарные задачи механики реагирующих сред. Новосибирск: Наука; СО АН СССР, 1984. 319 с.
6. *Ефимов К.Н., Овчинников В.А., Якимов А.С.* Математическое моделирование влияния вращения на характеристики сопряженного тепломассообмена при высокоэнтальпийном обтекании затупленного по сфере конуса под углом атаки // Теплофизика и аэромеханика. 2017. Т. 24. № 5. С. 677.
7. *Efimov K.N., Ovchinnikov V.A., Yakimov A.S.* Rotation Influence on Heat Transfer at Supersonic Flow around a Blunted Body // AIAA J. 2018. V. 56. № 2. P. 743.
8. *Ефимов К.Н., Овчинников В.А., Якимов А.С.* Численное исследование влияния вращения на характеристики сопряженного тепломассообмена при сверхзвуковом обтекании конуса, затупленного по сфере под углом атаки и массовом уносе с поверхности // ТВТ. 2018. Т. 56. № 2. С. 253.
9. *Гришин А.М., Голованов А.Н., Зинченко В.И., Ефимов К.Н., Якимов А.С.* Математическое и физическое моделирование тепловой защиты. Томск: Изд-во Томск. ун-та, 2011. 358 с.
10. *Полежаев Ю.В., Юревич Ф.П.* Тепловая защита. М.: Энергия, 1976. 392 с.
11. *Лунев В.В., Магомедов К.М., Павлов В.Г.* Гиперзвуковое обтекание притупленных конусов с учетом равновесных физико-химических превращений. М.: ВЦ АН СССР, 1968. 203 с.
12. *Горский В.В., Запривода А.В.* О применении полной термохимической модели разрушения углерода к задаче разрушения углепластика в условиях нестационарного нагрева // ТВТ. 2014. Т. 52. № 2. С. 240.
13. *Патанкар С., Сполдинг Д.* Тепло- и массообмен в пограничных слоях. М.: Энергия, 1970. 127 с.
14. *Cebeci T.* Behavior of Turbulent Flow near a Porouswall with Pressure Gradient // AIAA J. 1970. V. 8. № 12. P. 48.
15. *Dhawan D., Narasimha R.* Some Properties of Boundary Layer Flow During the Transition from Laminar to Turbulent Motion // J. Fluid Mechanics. 1958. № 3. P. 418.
16. *Гришин А.М., Зинченко В.И., Ефимов К.Н., Субботин А.Н., Якимов А.С.* Итерационно-интерполяционный метод и его приложения. Томск: Изд-во Томск. ун-та, 2004. 320 с.
17. *Feldhuhn R.N.* Heat Transfer from a Turbulent Boundary Layer on a Porous Hemisphere // AIAA Paper 76-119. 1976.
18. *Уидхопф Дж.Ф., Холл Р.* Измерение теплопередачи на затупленном конусе под углом атаки при переходном и турбулентном режимах течения // РТК. 1972. Т. 10. № 10. С. 71.
19. *Самарский А.А.* Введение в теорию разностных схем. М.: Наука, 1971. 552 с.
20. *Гофман А.Г., Гришин А.М.* Теоретическое исследование термохимического разрушения графита в высокоэнтальпийном воздухе // ПМТФ. 1984. № 4. С. 107.
21. *Бейкер Р.Л.* Влияние неравновесных химических процессов на сублимацию графита // РТК. 1977. Т. 15. № 10. С. 21.
22. *Андриевский Р.А.* Пористые металлокерамические материалы. М.: Металлургия, 1964. 187 с.
23. *Бучнев Л.М., Смыслов А.И., Дмитриев И.А. и др.* Экспериментальное исследование энтальпии квазимонокристалла графита и стеклоуглерода в интервале температур 300–3800 K // ТВТ. 1987. Т. 25. № 6. С. 1120.
24. *Алифанов О.М., Трянин А.П., Ложкин А.Л.* Экспериментальное исследование метода определения коэффициента внутреннего теплообмена из решения обратной задачи // ИФЖ. 1987. Т. 52. № 6. С. 461.
25. *Соседов В.П.* Свойства конструкционных материалов на основе углерода. Спр. М.: Металлургия, 1975. 335 с.

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР, 2021, том 59, № 1, с. 109–115

УДК 536.245.022

СНИЖЕНИЕ МАКСИМАЛЬНЫХ ТЕМПЕРАТУР ПОВЕРХНОСТИ ПРИ СВЕРХЗВУКОВОМ ОБТЕКАНИИ ЗАТУПЛЕННОГО ПО СФЕРЕ КОНУСА

© 2021 г. В. И. Зинченко[1], *, В. Д. Гольдин[1], **

[1]Томский государственный университет, Томск, Россия

**E-mail: vladislav.zinchenko@bk.ru*

***E-mail: vdg@math.tsu.ru*

Поступила в редакцию 28.11.2019 г.
После доработки 28.11.2019 г.
Принята к публикации 10.03.2020 г.

Рассмотрена сопряженная задача нестационарного теплообмена при сверхзвуковом обтекании затупленного по сфере конуса при большом числе Маха ($M_\infty = 9.9$). В этом случае максимальные температуры обтекаемой оболочки могут достигать температуры разрушения материала и важно оценить возможные способы их снижения. Обобщенные критериальные зависимости, полученные на основе численных расчетов нестационарной задачи в сопряженной постановке, позволяют оценить необходимое снижение максимальной температуры поверхности тела за счет выбора геометрических характеристик тела и теплофизических характеристик материалов для сферической и конической областей тела.

DOI: 10.31857/S0040364421010178

ВВЕДЕНИЕ

Требование сохранения геометрии летательного аппарата при больших временах движения вызывает необходимость использования различных материалов, в том числе высокотеплопроводных, обеспечивающих наряду с переизлучением поверхности тела снижение максимальных температур лобовой части [1–5].

Используя отработанную технологию решения задач в сопряженной постановке [6, 7], важно оценить возможности управления температурными режимами обтекаемых тел и получить критериальные зависимости для инженерных оценок максимальных температур T_w.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассматривается сверхзвуковое обтекание затупленных по сфере конических тел с углом полураствора 5°, радиусом сферического затупления R_N и различными длинами $z_c = 5$, 10, 20 при нулевом угле атаки. Лобовая часть тела выполнена из сплошного материала, а на боковой части (при $z > z_0$) имеется коническая оболочка постоянной толщины L, причем материалы в этих областях могут быть различными (рис. 1). Внутренняя часть тела представляет собой конус с торцевым затуплением. Все линейные размеры отнесены к R_N. Расчет течения в ламинарном пограничном слое проводился как в [1, 6], а тепловое поле в обтекаемой оболочке описывалось уравнениями теплопроводности, которые в предположении постоянства теплофизических характеристик материала имеют вид

$$\frac{1}{S_1}\frac{\partial\theta_1}{\partial\tau} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\tau}\left(r\frac{\partial\theta_1}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2\theta_1}{\partial z^2}, \quad (1)$$

$$\frac{\lambda_{s1}}{\rho_{s1}c_{s1}}\frac{\rho_{s2}c_{s2}}{\lambda_{s2}}\frac{1}{S_1}\frac{\partial\theta_2}{\partial\tau} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\tau}\left(r\frac{\partial\theta_2}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2\theta_2}{\partial z^2}. \quad (2)$$

Здесь $\theta_i = \dfrac{T_i}{T_{e0}}$; $S_i = \dfrac{\lambda_{si}}{\sqrt{\rho_{e0}\mu_{e0}V_m R_N}}\dfrac{T_{e0}}{h_{e0}}$; $\tau = \dfrac{\lambda_{s1}t}{\rho_{s1}c_{s1}R_N^2}\dfrac{1}{S_1}$; T – температура; t – время; z, r – геометрические координаты (рис. 1), отнесенные к R_N; λ_s, ρ_s, c_s – коэффициент теплопроводности, плотность и удельная теплоемкость твердого тела; h_{e0}, T_{e0} – энтальпия и температура набегающего потока в точке торможения; $V_m = \sqrt{2h_{e0}}$; ρ_{e0}, μ_{e0} – плотность и вязкость на внешней границе пограничного слоя в точке торможения; индексы $i = 1$, 2 отвечают расчетным областям тела (рис. 1).

В начальный момент времени задается температура тела

$$\theta_i(0, r, z) = \theta_{\text{ini}} = \frac{T_{\text{ini}}}{T_{e0}},$$

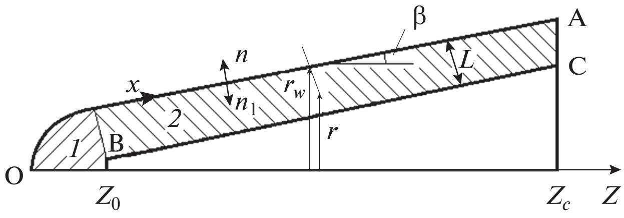


Рис. 1. Схема расчетной области.

где T_{ini} – начальное значение температуры. В качестве граничных условий для уравнений (1), (2) на оси симметрии, внутренней поверхности оболочки и ее тыльной части (линия AC на рис. 1) задаются условия тепловой изоляции:

$$\frac{\partial \theta_i}{\partial n} = 0,$$

где дифференцирование ведется по нормали к соответствующей поверхности. На границе областей *1*, *2* используются условия сопряжения, а на границе раздела газовой и твердой сред выставляются граничные условия четвертого рода, т.е. равенство температур и тепловых потоков в пограничном слое и твердом теле:

$$\tilde{q}_w - \pi_\sigma \theta_{wi}^4 = -S_i \frac{\partial \theta_i}{\partial n_1}. \quad (3)$$

Здесь $\tilde{q}_w = \dfrac{q_w}{q_w^*}$ – безразмерный тепловой поток от пограничного слоя, $q_w^* = \sqrt{\dfrac{\rho_{e0}\mu_{e0}V_m}{R_N}}h_{e0}$, $\pi_\sigma = \dfrac{\varepsilon\sigma T_{e0}^4\sqrt{R_N}}{h_{e0}\sqrt{\rho_{e0}\mu_{e0}V_m}}$, ε – степень черноты поверхности тела, σ – постоянная Стефана–Больцмана, n_1 – координата, отсчитываемая в глубь тела от его поверхности (рис. 1).

В переменных Дородницына–Лиза

$$\xi = \frac{x}{R_N}, \quad \zeta = \frac{u_e r_w}{\sqrt{2\int\limits_o^x \rho_e\mu_e u_e r_w^2 dx}}\int\limits_0^n \rho dn$$

для безразмерного теплового потока имеем

$$\tilde{q}_w = \sqrt{\frac{u_e}{V_m}\frac{\rho_e}{\rho_{e0}}\frac{\mu_e}{\mu_{e0}}\frac{1}{\alpha_1}}\left(\frac{l}{\Pr}\frac{\partial\theta}{\partial\zeta}\right)_w,$$

где $\alpha_1 = \dfrac{2\int_0^\xi \rho_e\mu_e u_e r_w^2 d\xi}{\rho_e\mu_e u_e r_w^2}$; $l = \dfrac{\rho\mu}{\rho_e\mu_e}$; Pr – число Прандтля, равное 0.72 для воздуха; x – длина дуги образующей поверхности тела; n – геометрическая координата, отсчитываемая внутрь пограничного слоя от обтекаемой поверхности; ρ – плотность газа в пограничном слое; u_e, ρ_e, μ_e – скорость, плотность и вязкость газа на внешней границе пограничного слоя.

Для случая единого материала в областях *1*, *2* наряду с решением двумерного уравнения теплопроводности температура тела рассчитывалась по одномерной модели в естественной системе координат [1]:

$$\frac{1}{S}\frac{\partial\theta}{\partial\tau} = \frac{1}{g}\frac{\partial}{\partial n_1}\left(g\frac{\partial\theta}{\partial n_1}\right), \quad g = \left(1 - \frac{n_1}{R}\right)\left(1 - \frac{n_1\cos\alpha}{r_w}\right).$$

При этом остаются прежними начальные и граничные условия. Здесь R – радиус кривизны образующей поверхности тела, α – угол между касательной к телу и осью симметрии, r_w – расстояние от поверхности тела до оси симметрии.

Решение уравнений теплопроводности определяется в основном параметрами сопряженности S_i и параметром π_σ, характеризующим излучение поверхности тела. В предельном случае ($S_i = 0$) решение системы уравнений пограничного слоя с граничным условием (3) дает распределение радиационно-равновесной температуры поверхности $\theta_{wr}(\xi)$. Случай $S_i \to \infty$ соответствует материалу с бесконечной теплопроводностью, при этом температура тела зависит только от времени, и уравнение для ее определения приведено в [1, 4].

МЕТОДИКА РЕШЕНИЯ И ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ

Методика решения и алгоритм численного расчета краевой задачи в сопряженной постановке подробно представлены в [1]. Здесь отличительным моментом явилось сквозное определение поля температур в теле при различных коэффициентах λ_{si} в областях *1*, *2*.

При проведении серийных численных расчетов использовались следующие входные данные: $M_\infty = 9.9$, $p_{e0} = 1.6$ бар, $T_{\text{ini}} = 293$ K, $\varepsilon = 0.8$, $z_0 = 0.96$, $L = 0.5$. Радиус затупления R_N принимался равным 0.005, 0.01, 0.04 м, базовая температура торможения T_{e0} – 3250 K. Также проводились расчеты при $T_{e0} = 1000$, 1500, 2000 K. Теплофизические характеристики материалов приведены в табл. 1 [8]. В случае различных материалов для сферической части использовалась сталь, а для конической – медь с характеристиками из табл. 1.

АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ

Рассмотрим вначале случай обтекания тела, выполненного из единого материала. В работе [1] при $M_\infty = 6.1$, $T_{e0} = 562$ K, $p_{e0} = 2.2$ бар проведено сравнение расчетных и экспериментальных значений [9] коэффициента $C_h = \dfrac{q_w}{\rho_\infty V_\infty c_p \left(T_{e0} - T_{w,\text{ini}}\right)}$ в зависимости от z в начальный момент времени, а затем рассмотрена эволюция температурного поля обтекаемых тел, выполненных из различных материалов, вплоть до выхода на стационарный режим. При этом значения определяющего параметра π_σ не превышали 0.38. При возрастании чисел Маха до 10 и высоте полета $H = 30$ км [2] значения π_σ могут возрастать в несколько раз, поэтому необходимо дать оценку возможности управления температурными режимами тела для данных практически важных условий.

Для $z_c = 5$, $R_N = 0.01$ м при указанных выше параметрах торможения на рис. 2 приведены значения температур поверхности тела, выполненного из представленных в табл. 1 материалов. Здесь же показано распределение температуры стенки $T_{wr}(\xi)$ при $S = 0$ (кривая *9*) и в предельном случае материала с бесконечной теплопроводностью — $S \to \infty$ (кривые *4*, *8*). Серия кривых *5*–*8* отвечает стационарным значениям $T_w(\xi)$ в момент времени $t = 250$ с, а кривые *1*–*4* соответствуют значениям $T_w(\xi)$ при $t = 10$ с.

Представленные результаты иллюстрируют возможности снижения максимальной температуры поверхности при выборе высокотеплопроводных материалов и носят модельный характер для уровня высоких температур, превышающих температуры разрушения материалов. Отметим, что максимальная температура достигается в критической точке.

Таблица 1. Теплофизические параметры материалов

	λ_s, Вт/(м K)	ρ_s, кг/м^3	c_s, Дж/(кг K)
Сталь-1	20	7800	600
Сталь-2	125	7800	600
Медь	386	8950	370

Для оценки максимальной температуры при $t \to \infty$ в критериальном виде на рис. 3, 4 представлены зависимости безразмерной температуры в критической точке

$$\varphi_{\text{st}} = \frac{\theta_{w0r} - \theta_{w0}}{\theta_{w0r} - \theta_{w0}\left(\lambda_s \to \infty\right)} \tag{4}$$

от основных определяющих параметров задачи S и π_σ. На рис. 3 φ_{st} приведена для различных удлинений конической части тела, и здесь же показано влияние параметра π_σ. При $\pi_\sigma > 0.4$ кривые φ_{st} ведут себя линейным образом с близкими углами наклона для различных S и z_c (рис. 4).

Для предельных условий по S ($\lambda_s = 0$ и $\lambda_s \to \infty$) на рис. 5 приведены максимальные температуры в зависимости от параметра π_σ для различных удлинений конической части. При $\pi_\sigma \geq 0.4$ θ_{w0} в случае $\lambda_s \to \infty$ оказывается ниже радиационно-равновесной температуры θ_{w0r} на 30–50% в зависимости от z_c. При $\pi_\sigma < 0.4$ результаты расчета согласуются с данными [1]. Здесь же для примера приведены данные расчетов для $S = 6$ (кривые *2*), из которых следует, что при данных и меньших значениях параметра сопряженности S максимальная температура в критической точке слабо

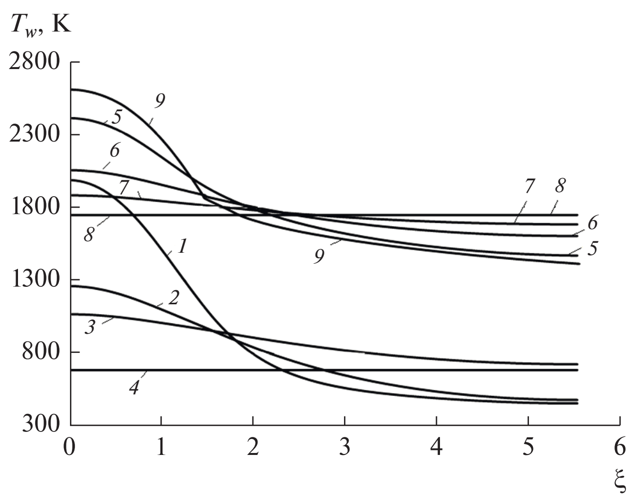


Рис. 2. Температура поверхности тела из сталей Ст1 (*1*, *5*) и Ст2 (*2*, *6*), меди (*3*, *7*) и материала с бесконечной теплопроводностью (*4*, *8*) в моменты времени $t = 10$ (*1*–*4*) и 250 с (*5*–*8*); *9* – радиационно-равновесная температура.

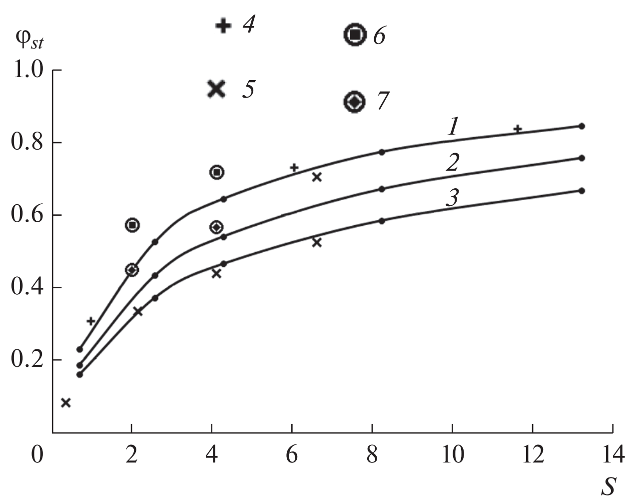


Рис. 3. Зависимость безразмерной температуры φ_{st} от параметра сопряженности S: при $\pi_\sigma = 0.53$ и $z_c = 5$ (*1*), 10 (*2*), 20 (*3*); *4* – $\pi_\sigma = 0.38$, *5* – 1.06; и для составного материала при $\pi_\sigma = 0.53$, $S_1 = 2$, 4, $S_2 = 13$ и $z_c = 5$ (*6*), 20 (*7*).

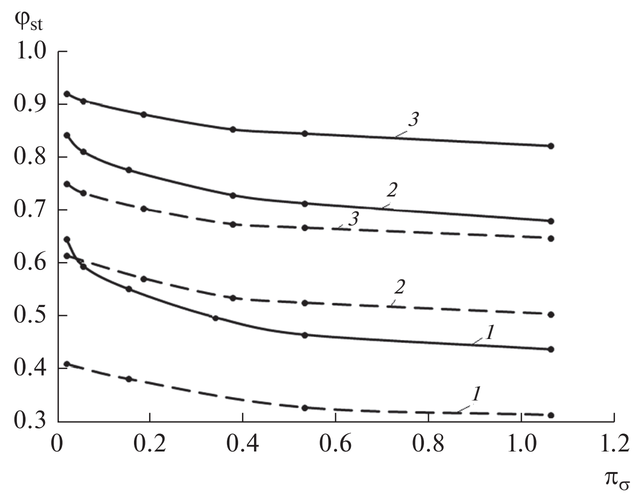


Рис. 4. Зависимость безразмерной температуры φ_{st} от параметра π_σ при S = 2 (*1*), 6 (*2*), 13 (*3*); сплошные кривые – z_c = 5, штриховые – 20.

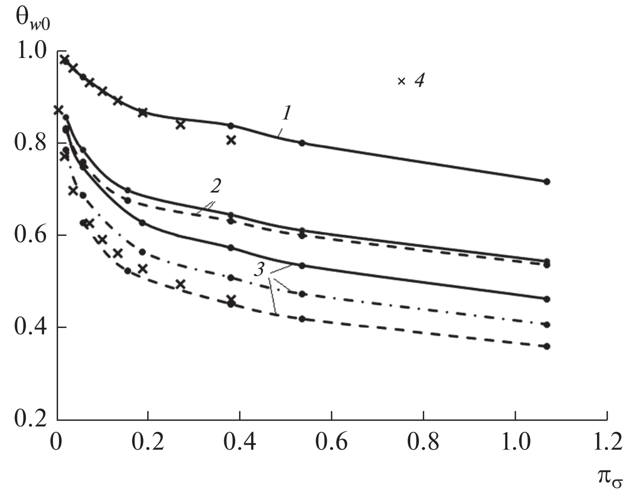


Рис. 5. Стационарная температура в критической точке при S = 0 (*1*), 6 (*2*), ∞ (*3*); сплошные линии – z_c = 5, штриховые – 20, штрихпунктирные – 10; *4* – результаты [1].

зависит от удлинения конической части, а ее снижение по отношению к θ_{w0r} при $\pi_\sigma \geq 0.4$ составляет около 25%.

Отметим, что, используя критериальные зависимости, приведенные на рис. 3, 4, а также значения температуры, найденные для предельных условий по S (θ_{w0r}, $\theta_{w0}(\lambda_s \to \infty)$), из выражения (4) можно определить значение θ_{w0} в расчетном диапазоне S, π_σ. Погрешность нахождения θ_{w0} с учетом возможной линейной интерполяции по определяющим критериям не превышает 2%. Такой подход позволяет избежать массовых точных расчетов двумерной задачи теплопроводности в теле, в том числе при усложнении внутренней геометрии обтекаемой оболочки.

Влияние относительной толщины оболочки L на максимальную температуру θ_{w0} представлено в табл. 2 для различных значений π_σ и S. Как и для базовой толщины $L = 0.5$, при двух других значениях имеет место слабое влияние длины тела на θ_{w0} при $S \leq 6$ практически во всем расчетном диапазоне π_σ. При возрастании L (≥0.5) наблюдается слабое уменьшение температуры θ_{w0} для фиксированных значений S. В то же время в диапазоне $0.1 \leq L \leq 0.5$ при возрастании L происходит существенное снижение θ_{w0}, что приводит в данных условиях к уменьшению максимальной температуры тела. Снижение температур θ_{w0} может достигать 25–30% (табл. 2) от максимальных значений в зависимости от выбора определяющих параметров задачи.

Рассмотрим далее температурный режим в окрестности лобовой критической точки для нестационарных условий и однородного материала обтекаемой оболочки. На рис. 6а показана зависимость от времени безразмерной температуры $\theta_{w0}(\tau)$ для различных материалов (кривые *1*–*4*), а также приведены данные одномерных расчетов (кривые *5*, *5*'). Здесь и ниже кривые со штрихами отвечают π_σ = 1.06. В принятых переменных результаты одномерных расчетов для различных материалов ложатся практически на одну кривую при $S > 2$. На нестационарном участке эффективность использования высокотеплопроводных материалов может значимо возрастать.

Как и в [1], введем нестационарный аналог функции φ_{st}

$$\varphi_{nst} = \frac{\theta_{w01}(\tau, \lambda_s) - \theta_{w02}(\tau, \lambda_s)}{\theta_{w01}(\tau, \lambda_s) - \theta_{w02}(\tau, \lambda_s \to \infty)}, \quad (5)$$

Таблица 2. Максимальная температура поверхности θ_{w0}

π_σ	0.53						1.06					
S	4.3			13			4.1			13		
L	0.1	0.5	0.8	0.1	0.5	0.8	0.1	0.5	0.8	0.1	0.5	0.8
θ_{w0}, z_c = 5	0.67	0.63	0.62	0.62	0.58	0.57	0.60	0.57	0.56	0.55	0.51	0.51
θ_{w0}, z_c = 20	0.67	0.63	0.61	0.61	0.55	0.53	0.60	0.56	0.55	0.54	0.49	0.48

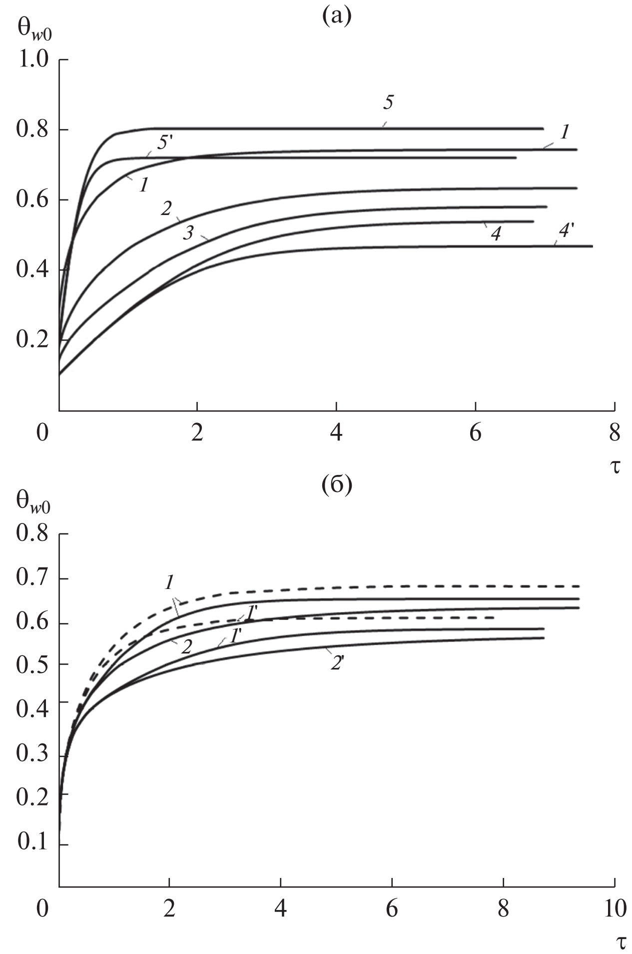


Рис. 6. Временна́я зависимость безразмерной температуры в критической точке тела с однородным (а) и составным покрытием (б) при $\pi_\sigma = 0.53$ (*1*, *2*) и 1.06 (*1'*, *2'*): (а) $z_c = 5$, *1* – $S = 0.69$, *2* – 4.3, *3* – 13, *4* – ∞, *5* – одномерный расчет; (б) *1* – $z_c = 5$, $S_1 = 2$, $S_2 = 13$; *2* – 20, 2, 13; штриховые линии – однородный материал при $S = 2$.

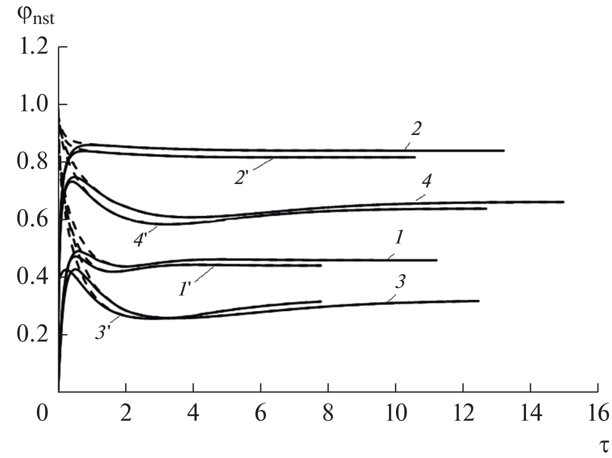


Рис. 7. Временна́я зависимость φ_{nst} в критической точке при $\pi_\sigma = 0.53$ (*1–4*) и 1.06 (*1'–4'*): *1* – $S = 2$, $z_c = 5$; *2* – 13, 5; *3* – 2, 20; *4* – 13, 20.

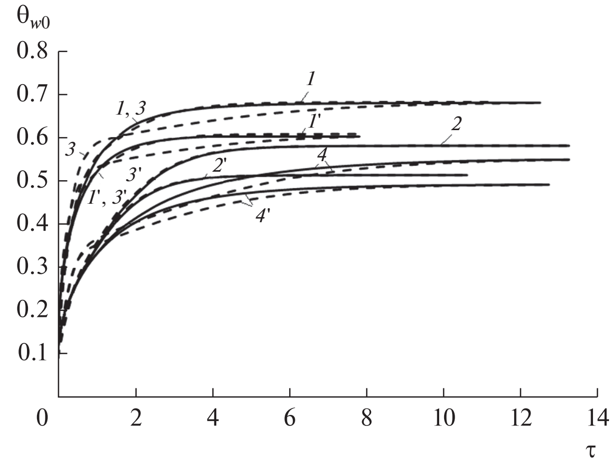


Рис. 8. Температура в критической точке в зависимости от времени при $\pi_\sigma = 0.53$ (*1–4*) и 1.06 (*1'–4'*): *1–4* – то же, что на рис. 7; штриховые линии – приближенное решение.

где индексы 1, 2 отвечают одномерному и двумерному случаям. На рис. 7 представлена временна́я зависимость φ_{nst}. Здесь для двух значений $S = 2$, 13 при двух значениях удлинения $z_c = 5$, 20 приведены кривые для $\pi_\sigma = 0.53$ и 1.06. Штриховыми линиями показана зависимость

$$\tilde{\varphi}_{nst} = \frac{\theta_{w0r} - \theta_{w02}(\tau, \lambda_s)}{\theta_{w0r} - \theta_{w02}(\tau, \lambda_s \to \infty)}.$$

При этом $\tilde{\varphi}_{nst}$ значительно отличается от φ_{nst} в моменты времени, близкие к начальному, но при $\tau \geq 2$ они практически совпадают, так как одномерный расчет быстро выходит на значение θ_{w0r}.

Учитывая поведение функции φ_{nst}, можно заметить, что для $\tau \geq 1$ ее максимальное отличие от своего стационарного значения φ_{st} не превышает 10%, что позволяет приравнять эти величины в расчетном диапазоне τ. Тогда из (5) вытекает

$$\theta_{w02}(\tau, \lambda_s) = \theta_{w01}(\tau, \lambda_s) - \\ - \varphi_{st}\left[\theta_{w01}(\tau, \lambda_s) - \theta_{w02}(\tau, \lambda_s \to \infty)\right]. \quad (6)$$

На рис. 8 для условий рис. 7 дано сравнение нестационарного численного решения (сплошные кривые) и приближенного, найденного из (6), (штриховые кривые). Видно, что приближенное решение дает высокую точность при $z_c = 5$, которая снижается при $\tau < 8$ и $z_c = 20$.

Таким образом, для нестационарных условий обтекания тела может быть использован приближенный способ определения его максимальных температур, включающий определение φ_{st} в стационарном случае и температуры поверхности тела в предельных случаях нетеплопроводного материала θ_{w0r} и абсолютно теплопроводного тела $\theta_{w02}(\tau, \lambda_s \to \infty)$, а также результаты одномерного расчета температуры поверхности при отсутствии

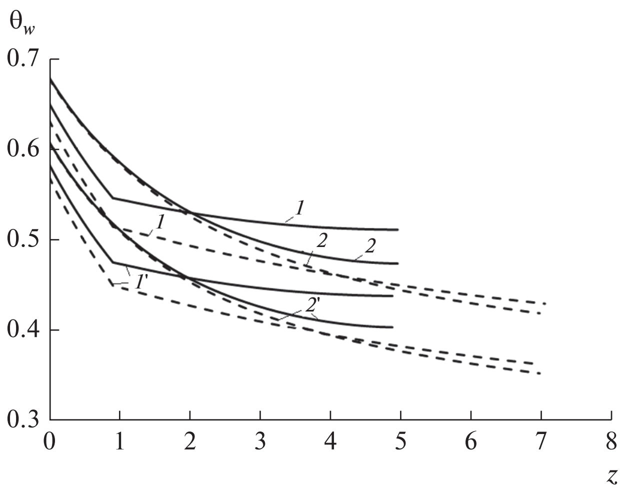


Рис. 9. Распределение стационарной температуры вдоль поверхности тела из составного (*1*) и однородного (*2*) материалов при $\pi_\sigma = 0.53$ (*1*, *2*) и 1.06 (*1*', *2*'): сплошные линии – $z_c = 5$, штриховые – 20.

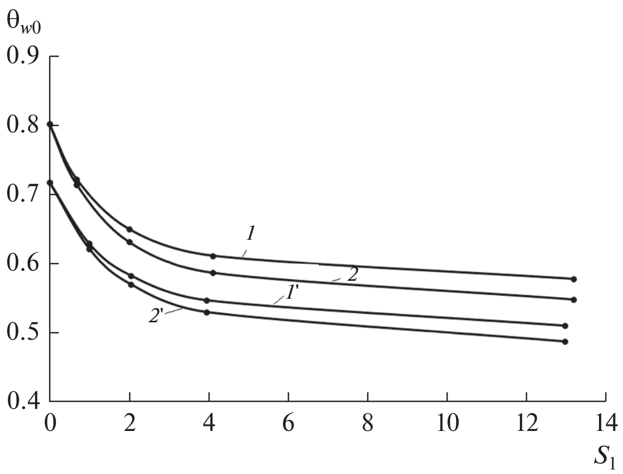


Рис. 10. Зависимость максимальной стационарной температуры от параметра сопряженности S_1 при $\pi_\sigma = 0.53$ (*1*, *2*) и 1.06 (*1*', *2*'): *1*, *1*' – $z_c = 5$; *2*, *2*' – 20.

продольного перетекания тепла по ней $\theta_{w01}(\tau, \lambda_s)$. Как указывалось выше, при $\tau \geq 1$ значения $\theta_{w01}(\tau, \lambda_s)$ могут быть заменены значением θ_{w0r}.

Рассмотрим далее случай различных материалов сферической и конической частей. На рис. 6б представлена зависимость $\theta_{w0}(\tau)$ для двух значений z_c (5, 20), двух значений π_σ (0.53, 1.06) при $S_1 = 2$, $S_2 = 13$. Здесь же для сравнения приведены соответствующие зависимости θ_{w0} для однородного материала $S_1 = S_2 = 2$ при $z_c = 5$ (штриховые линии). Таким образом, получается комбинация высокотемпературного (область 1) и высокотеплопроводного (область 2) материалов; такая комбинация обеспечивает снижение максимальной температуры по отношению к однородному материалу на 4–7% в зависимости от z_c.

Распределение стационарной температуры поверхности $\theta_w(z)$ для различных длин тела показано на рис. 9. Кривые *1*, *1*', имеющие разрыв производной, соответствуют различным материалам ($S_1 = 2$, $S_2 = 13$), а кривые *2*, *2*' отвечают однородному материалу при $S_1 = S_2 = 2$. Как и выше, кривые без штрихов и со штрихами построены для $\pi_\sigma = 0.53$ и 1.06 соответственно. Как и следовало ожидать, для однородного материала при $S = 2$ максимальная температура в окрестности критической точки при различных π_σ не зависит от длины тела z_c. В то же время использование различных материалов позволяет управлять снижением температуры поверхности θ_{w0}. На периферийной конической части тела рост S_2 вследствие повышения коэффициента теплопроводности материала обеспечивает рост температуры поверхности и выполаживание зависимости $\theta_w(z)$. Качественно такое поведение температуры в этой области отвечает зависимостям $\theta_w(\xi)$ для различных λ_s, которые рассматривались при анализе рис. 2.

Интересно оценить влияние коэффициента теплопроводности в области 1 высокотемпературного материала и параметра S_1 на максимальное значение θ_{w0} при заданном значении S_2 в области высокотеплопроводного материала. На рис. 3 для двух длин z_c (5, 20) показано значение φ_{st} при $S_1 = 2$, 4 (значки внутри кружков). Такая обработка отражает факт заметного снижения температуры θ_{w0} по отношению к однородному материалу обтекаемого тела. Так, для $z_c = 5$ значения θ_{w0} составляют 0.95 и 0.9 от максимальной температуры однородного материала при $S_1 = 2$ и $S_1 = 4$. Если $z_c = 20$, то это отношение равно 0.93 и 0.87 соответственно.

На рис. 10 показана зависимость θ_{w0} от параметра S_1 при заданном значении $S_2 = 13$ для различных величин π_σ и z_c. При $S_1 \geq 6$ максимальная температура меняется слабо в пределах 5%. Отсюда вытекает близкий к оптимальному уровню диапазон значений S_1 (2–5), при котором заметно снижается уровень максимальных температур при соответствующем выборе высокотемпературного материала сферического затупления.

Таким образом, меняя соотношение коэффициентов теплопроводности материалов сферической и конической частей, можно влиять на снижение максимальной температуры в окрестности критической точки. При этом, как вытекает из рис. 6б, для нестационарного участка процесса это снижение может быть заметно бóльшим.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для нулевого угла атаки в области больших значений чисел Маха (до 10.0) и высоких температур торможения (до 3250 K) на высотах порядка 30 км рассмотрена задача снижения максимальной температуры поверхности затупленного по сфере конуса ниже температуры разрушения материала тела. На основе нестационарной задачи в сопряженной постановке изучены возможные способы управления температурными режимами за счет выбора теплофизических характеристик материала и геометрических характеристик модели: радиуса R_N, длины z_c и толщины оболочки L. Показано, что использование высокотеплопроводных материалов тела в целом либо комбинации высокотемпературных материалов на затуплении и высокотеплопроводных на конической части дает возможность существенно снизить максимальную температуру лобовой критической точки. Построенные критериальные зависимости позволяют оценивать максимальные значения T_{w0} во всем диапазоне времен движения.

Оценено применение часто используемой одномерной модели распространения тепла в теле и показана возможность кратной ошибки в определении максимальных температур для перспективных высокотеплопроводных материалов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Зинченко В.И., Гольдин В.Д.* Решение сопряженной задачи нестационарного теплообмена при сверхзвуковом обтекании затупленного по сфере конуса // ИФЖ. 2019. Т. 92. № 1. С. 137.
2. *Гешеле В.Д., Полежаев Ю.В., Раскатов И.П., Стоник О.Г., Габбасова Г.В.* Возможности повышения скорости полета гиперзвуковых летательных аппаратов // ТВТ. 2013. Т. 51. № 5. С. 798.
3. *Башкин В.А., Решетько С.М.* Температурный режим затупленных клиньев и конусов в сверхзвуковом потоке с учетом теплопроводности материала // Уч. зап. ЦАГИ. 1990. Т. XXI. № 4. С. 11.
4. *Зинченко В.И., Лаева В.И., Сандрыкина Т.С.* Расчет температурных режимов обтекаемых тел с различными теплофизическими характеристиками // ПМТФ. 1996. Т. 37. № 5. С. 105.
5. *Зинченко В.И., Гольдин В.Д., Зверев В.Г.* Численное моделирование влияния материалов тепловой защиты на характеристики сопряженного тепломассообмена при пространственном обтекании затупленных тел // ТВТ. 2018. Т. 56. № 5. С. 747.
6. *Зинченко В.И.* Математическое моделирование сопряженных задач тепломассообмена. Томск: Изд-во Томск. ун-та, 1985. 222 с.
7. *Гришин А.М., Голованов А.Н., Зинченко В.И., Ефимов К.Н., Якимов А.С.* Математическое и физическое моделирование тепловой защиты. Томск: Изд-во Томск. ун-та, 2011. 358 с.
8. Физические величины. Спр. / Под. ред. Григорьева И.С., Мейлихова Е.З. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.
9. *Бражко В.Н., Ваганов А.В., Ковалева Н.А., Колина Н.П., Липатов И.И.* Экспериментальные и расчетные исследования перехода в пограничном слое на затупленных конусах при сверхзвуковом обтекании // Уч. зап. ЦАГИ. 2009. Т. XL. № 3. С. 21.

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР, 2021, том 59, № 1, с. 116–125

УДК 532.517.4:536.244

АНАЛИЗ АНОМАЛЬНОЙ ИНТЕНСИФИКАЦИИ ОТРЫВНОГО ТЕЧЕНИЯ И ТЕПЛООБМЕНА НА СТАБИЛИЗИРОВАННОМ УЧАСТКЕ УЗКОГО КАНАЛА С ОДНОРЯДНЫМИ НАКЛОНЕННЫМИ ОВАЛЬНО-ТРАНШЕЙНЫМИ ЛУНКАМИ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ РАЗЛИЧНЫХ СЕТОК И МОДЕЛЕЙ ТУРБУЛЕНТНОСТИ

© 2021 г. С. А. Исаев[1, 2, *], А. Ю. Чулюнин[3], Д. В. Никущенко[2], А. Г. Судаков[1], А. Е. Усачов[4]

[1]*Санкт-Петербургский государственный университет гражданской авиации, Санкт-Петербург, Россия*
[2]*Санкт-Петербургский государственный морской технический университет, Санкт-Петербург, Россия*
[3]*Институт механики МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*
[4]*Московский комплекс Центрального аэрогидродинамического института, Москва, Россия*
**E-mail: isaev3612@yandex.ru*

Поступила в редакцию 20.02.2020 г.
После доработки 17.05.2020 г.
Принята к публикации 18.06.2020 г.

Дан анализ интенсификации отрывного течения и теплообмена в однорядных, наклоненных под углом 45° овально-траншейных лунках на нагретой стенке узкого канала на участке стабилизации турбулентного потока при Re = 10^4. Обнаружены аномально высокие скорости возвратного и вторичного течения (порядка среднемассовой скорости в канале), а также во входной части лунки многократное превышение абсолютных величин отрицательного трения (в 4.5 раза) и тепловых потоков (в пять раз) над трением и числом Нуссельта на нагретой стенке плоскопараллельного гладкого канала. Установлена связь этого явления с перепадом полного давления между близкими зонами торможения потока на наветренном склоне лунки и разрежения в месте генерации смерчеобразной вихревой структуры. Обсуждаются неопределенности численных прогнозов при использовании различных сеток и полуэмпирических моделей турбулентности в пакетах StarCCM+ и VP2/3.

DOI: 10.31857/S004036442101004X

ВВЕДЕНИЕ

Поверхностные вихревые генераторы вызывают значительный интерес как устройства для интенсификации теплообмена, характеризующиеся умеренным ростом гидравлических потерь [1, 2]. Следует отметить, что наметился переход от упорядоченных пакетов сферических лунок с большой плотностью нанесения таких ямок на омываемые поверхности к одно- и многорядным пакетам наклоненных овально-траншейных лунок (ОТЛ) с меньшей плотностью.

В [3–5] выполнено исследование конвективного теплообмена при турбулентном обтекании водой уединенных наклоненных ОТЛ на стенке узкого канала в широком диапазоне изменения геометрических размеров лунки при фиксированных площади пятна и глубине, отнесенной к высоте канала, с варьированием угла наклона θ от 30° до 60° и числа Рейнольдса от 10^4 до 10^5. Обосновано значительное преимущество предложенных форм лунок большого удлинения (отношение длины к ширине λ порядка 7) над сферическими и коническими аналогами по тепловой и теплогидравлической эффективности. Обнаружено, что в наклоненных ОТЛ экстремальные величины скорости вторичного течения приближаются к характерной среднемассовой скорости потока в узком канале. Показано, что с ростом относительного удлинения λ ОТЛ происходит перестройка отрывного течения с формированием в ней спиралевидного вихря и безотрывного закрученного потока на большей части ОТЛ. Установлен оптимальный угол θ наклона ОТЛ, соответствующий максимальным величинам тепловой и теплогидравлической эффективности и лежащий в диапазоне 45°–52°.

В [6] рассчитывается ламинарный и турбулентный (Re меняется от 100 до 20000) конвективный теплообмен при движении воздуха в узком канале шириной $B = 2.5$ с пакетом из 22 однорядных наклоненных под углом $\theta = 45°$ овальных лунок умеренного удлинения ($\lambda = 1.8$) и глубины ($\Delta = 0.2$). Ширина лунки b выбрана в качестве характерного линейного размера, радиус скругления кромки $R = 0.25$, высота канала изменяется от 0.44 до 0.8, а продольный шаг между центрами лунок $S = 1.8$. При таком довольно большом шаге в узком канале можно выделить компактный модуль длиной L с уединенной овальной лункой на нагретой стенке и проточными (входной и выходной) границами, на которых задаются периодические граничные условия (здесь $L = S$). Показано, что локальная и интегральная (оцененная по поперечным полосам и прямоугольным участкам) тепловая нагрузка по длине канала с однорядными овальными лунками нарастает волнообразно, причем пиковые величины сначала достигают наибольшего значения, а затем несколько уменьшаются, выходя на стабильный уровень с некоторой (с 12 при Re = 20000) лунки. Выход на автомодельный режим обтекания характеризуется повторяющимися распределениями характеристик потока, турбулентности и температуры, которые оказались близкими к теплогидравлическим характеристикам модуля с периодическими граничными условиями на проточных границах.

В [7–12] анализируются асимптотические характеристики ламинарного и турбулентного течения воздуха, а также конвективного теплообмена в узких каналах с однорядными наклоненными ОТЛ на стабилизированном гидродинамическом участке.

В ламинарном режиме при Re = 1000 в центре нагретой стенки в периодическом модуле узкого канала длиной $L = 4$, высотой 1 и шириной $B = 6$ размещается наклоненная под углом $\theta = 45°$ ОТЛ шириной $b = 1$, длиной $\lambda = 4.5$, радиусом скругления кромки $R = 0.025$ и глубиной Δ, изменяющейся в диапазоне от 0 до 0.375 [7, 8]. С ростом Δ обнаружена и объяснена значительная интенсификация ламинарного отрывного течения на входе в наклоненную лунку с двукратным увеличением по модулю максимума относительного трения при $\Delta = 0.375$ по сравнению с уровнем этой величины при $\Delta = 0.1125$–0.25. Максимальная абсолютная величина скорости вторичного течения в лунке достигает 0.72 от среднемассовой скорости. Для однорядных наклоненных овально-траншейных лунок глубиной свыше 0.25 в узком канале открыто явление ускорения ламинарного потока с полуторакратным ростом максимальной скорости в ядре. Установлено, что причина интенсификации ламинарного отрывного и вторичного течения в наклоненной овально-траншейной лунке заключается в резком перепаде статического давления (максимум порядка 0.34 и минимум порядка –0.14 при $\Delta = 0.3125$) на близком расстоянии между центрами зон высокого и низкого давления во входной части лунки. С ростом Δ увеличиваются локальные относительные тепловые нагрузки на наветренном склоне входной части лунки, достигая 16–17. Тепловая эффективность, определяемая относительным суммарным числом Нуссельта, осредненным по омываемой поверхности участка с наклоненной лункой, имеет максимум порядка 1.8 при $\Delta = 0.3125$, однако максимальная теплогидравлическая эффективность реализуется при $\Delta = 0.25$ и составляет 1.3. Следует отметить, что сферические лунки на стенке канала для воздушного теплоносителя оказываются неэффективными.

Аномальная интенсификация отрывного турбулентного течения воздуха и теплообмена исследуется при $\mathrm{Re} = 10^4$ в периодических модулях узкого канала высотой 1 с размерами $L = 6$, $B = 7$ [9] и $L = 8$, $B = 9$ [10–12]. Рассматривается ОТЛ шириной $b = 1.05$, длиной $\lambda = 7.05$ и радиусом скругления кромки $R = 0.21$. В [9] глубина лунки $\Delta = 0.3$, $S = L = 6$, а угол наклона $\theta = 45°$. В [10] $\Delta = 0.25$, $S = L = 8$, а θ варьируется от 1° до 89°. В [11, 12] $\Delta = 0.25$, $\theta = 65°$, S варьируется от 2 до 8. В [11] дополнительно анализируется $\theta = 53°$.

Аномальная интенсификация отрывного течения в наклоненной ОТЛ определяется по достижению ультравысокой скорости возвратного течения во входной сферической части лунки, приближающейся по величине к среднемассовой скорости потока в канале. По сравнению со сферическими лунками скорость отрывного течения возрастает в 2–3 раза. Также интенсифицируется вторичное течение в наклоненной ОТЛ, причем максимальная скорость поперечного потока может превысить максимальную скорость в плоскопараллельном гладком канале примерно на 10%. Как и в ламинарном потоке в узком канале с однорядными наклоненными ОТЛ, в ядре турбулентного потока возникают зоны ускорения течения до скоростей, превосходящих в 1.39 раза максимальную скорость потока в гладком канале. Интенсификация отрывного течения и теплообмена в периодическом модуле усиливается по мере уплотнения лунок. Так, при $S = 2$ в отрывной зоне лунки наблюдается четырехкратное падение минимальной величины относительного отрицательного трения и 6.5-кратный рост максимальной величины относительной теплоотдачи. Причина аномальной интенсификации тепло- и массообменных процессов в отрывной зоне внутри наклоненной ОТЛ связана с образованием очень большого перепада (доходящего до 1.2) давления между близко расположенными зонами торможения внешнего втекающего в лунку потока на наветренном ее склоне и зоной глубокого разрежения во входном сферическом сегменте в месте, где генерируется мощный спиралеобразный вихрь.

В данной работе уточняется численное моделирование аномальной интенсификации отрывного течения воздуха и теплообмена в однорядных наклоненных ОТЛ на стенке узкого канала на стабилизированном участке [9]. С этой целью сравниваются характеристики стационарного течения и теплообмена, рассчитанные на сетках разной топологии с помощью различных пакетов, а также с использованием одно- и двухпараметрических полуэмпирических дифференциальных моделей. Анализируются развитие закрученного воздушного потока в наклоненной лунке в периодическом модуле канала и формирование поля высоких тепловых нагрузок в ареале лунки.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ, МОДЕЛИ И МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ

На стабилизированном гидродинамическом участке узкого канала с однорядными ОТЛ, ориентированными под углом 45° к потоку, рассчитывается стационарное турбулентное отрывное течение воздуха и конвективный теплообмен. Верхняя изотермическая и боковые теплоизолированные стенки канала плоские. Ширина канала $B = 7$, а высота, равная единице, выбрана в качестве характерного размера. В центре расчетного периодического канального модуля длиной $L = 6$ на нижней нагретой до постоянной температуры стенке располагается наклоненная ОТЛ. Как и в [9], ширина ОТЛ равна 1.05, глубина – 0.3, длина – 7.05. Радиус скругления кромки лунки принимается равным 0.21. Вводится система декартовых координат (x, y, z) с центром в продольной срединной плоскости на нижней стенке во входном сечении периодического модуля (рис. 1а). Ось x ориентирована вдоль, а ось z поперек канала. Декартовые скорости u, v, w, характеристики турбулентности (энергия k, удельная скорость диссипации ω, вихревая вязкость μ_t) и число Рейнольдса определяются по среднемассовой скорости потока U_{bl}. В качестве характерной температуры выбрана температура верхней стенки, равная 293 K (безразмерная величина – 1). Нижняя стенка нагрета до 303 K (безразмерная величина – 1.034).

В базовом варианте решения задачи с помощью пакета VP2/3 (скорость–давление, 2D/3D) система стационарных осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье–Стокса, записанная в предположении постоянной плотности низкоскоростного потока воздуха, замыкается с помощью дифференциальных уравнений модели переноса сдвиговых напряжений (SST), модифицированной в рамках подхода Роди–Лешцинера–Исаева с учетом кривизны линий тока [13, 14]. При расчете вихревой вязкости μ_t на основе этого подхода используется поправочная функция $fc = = 1/(1 + Cc\mathrm{Ri}_t)$ с полуэмпирической константой $Cc = 0.02$, подобранной из условия наилучшего согласования численных прогнозов и экспериментальных данных для многочисленных примеров отрывных течений (Ri_t – турбулентное число Ричардсона).

Периодические граничные условия выполняются на проточных границах A, B (рис. 1а) расчетного модуля, и условия прилипания задаются на стенках канала. Процедура коррекции давления [14] применяется для решения задачи с фиксированным массовым расходом. Для решения уравнения энергии используется процедура коррекции среднемассовой температуры [6]. При дискретизации дифференциальных уравнений применяются противопоточные схемы QUICK и TVD [14]. Многоблочные вычислительные технологии [14] и алгебраический ускоритель сходимости итераций в блоке поправки давления [15] реализованы в пакете VP2/3.

В методическом исследовании для описания турбулентного потока в пакете StarCCM+ используются осредненные по Рейнольдсу уравнения Навье–Стокса (RANS-подход), замыкаемые выбранными тремя моделями турбулентности: k–ε-Realizable [16] с двухслойной моделью в формулировке Вольфштейна [17]; SST-модель с поправкой Дурбина [18]; модель вихревой вязкости Спаларта–Аллмареса [19] (SA) с модифицированным членом, описывающим генерацию турбулентности [20]. Для дискретизации конвективных членов во всех случаях используется противопоточная схема второго порядка с ограничи-

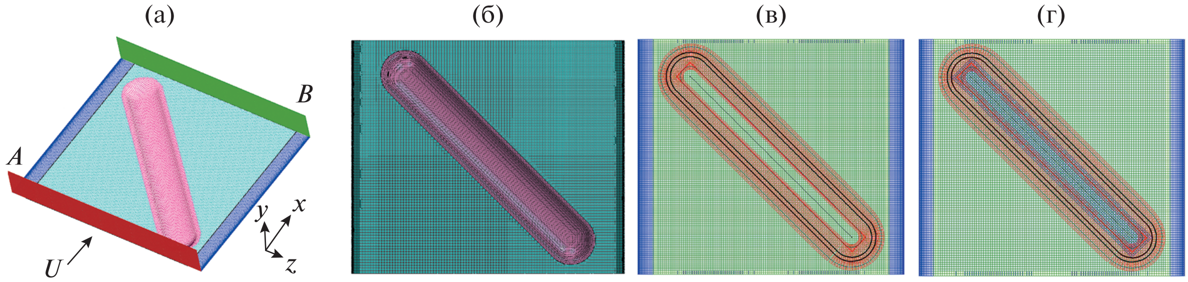


Рис. 1. Периодическая расчетная секция узкого канала с наклоненной под углом 45° овально-траншейной лункой на нижней стенке с нанесенной моноблочной структурированной сеткой MG (а), моноблочной неструктурированной сеткой HG (б), многоблочной сеткой с тремя фрагментами MBG3 (в) и многоблочной сеткой с четырьмя фрагментами MBG4 (г).

телем [21]. Решение получаемых после дискретизации алгебраических уравнений получается с помощью солвера Algebraic Multigrid (AMG) с предобусловливателем для давления [22].

Следует отметить, что специализированный пакет VP2/3 и универсальный коммерческий продукт StarCCM+ обладают сходными по вычислительной эффективности характеристиками.

Подход к моделированию отрывного течения и теплообмена на основе решения осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье–Стокса продолжает вызывать дискуссии. Как правило, его применимость подтверждается при сравнении численных прогнозов с имеющимися экспериментальными данными. Работ, связанных с измерениями характеристик вихревого течения и теплообменом в каналах с лунками, немного, и в подавляющем большинстве в них рассматриваются сферические лунки. В [5] показано хорошее согласие рассчитанных с помощью модифицированной SST-модели и измеренных в [23] локальных и интегральных характеристик в узком канале с уединенной нагретой лункой умеренной глубины. В [24] получено приемлемое согласие численных прогнозов с использованием различных полуэмпирических моделей с данными физического эксперимента [25] в канале с уединенной сферической лункой. В [26] представлено вполне удовлетворительное соответствие рассчитанных и измеренных интегральных характеристик по теплоотдаче в канале с шахматным пакетом сферических и каплеобразных лунок. В целом осредненные локальные и интегральные характеристики отрывного течения и теплообмена в лунках прогнозируются вполне удовлетворительно, что позволяет применить RANS-подход для анализа теплообмена в интенсивных отрывных и закрученных потоках в наклоненных овально-траншейных лунках на стенке узкого канала.

РАСЧЕТНЫЕ СЕТКИ

В табл. 1 собраны сведения обо всех использованных расчетных сетках. Кроме общего количества расчетных ячеек NNN, приведены максимальные шаги сетки Δxz_m в продольном и поперечном направлениях срединной части канала. Все сетки сгущаются к стенкам, причем пристеночный шаг равен 10^{-4}. В пакете VP2/3 моноблочная структурированная сетка (MG) в центральной части расчетной области имеет квадратные ячейки в x, z-направлениях размером 0.04 (рис. 1а). Также моноблочная, но неструктурированная сетка с преимущественным гексагональным типом ячеек (HG) близкого размера 0.035 используется в расчетах по пакету StarCCM+ (рис. 1б). В пакете VP2/3 применяются многоблочные разномасштабные сетки (MBG3 и MBG4), которые генерируются из трех и четырех пересекающихся фрагментов (рис. 1в, 1г). Первая сетка прямоугольная и согласованная со стенками канала. Размер пристеночных ячеек Δxz_m в центральной части модуля выбирается равным 0.05. В MBG3 в нее вкладывается измельченная криволинейная сетка, согласованная с поверхностью лунки (рис. 1в). Третья сетка кромочная и служит для разрешения зон с высокими градиентами скорости вблизи сильных изгибов омываемой поверхности. Однако расчетные ячейки в окрестности кромки характеризуются большими углами скоса, так как сеточные линии кромочной сетки согласуются с вертикальной осью y. В MBG4 вторая измельченная сетка прямоугольная и покрывает область лунки, а также след за ней (рис. 1г). Криволинейная, близкая к ортогональной сетка О-типа строится вокруг наклоненной овально-траншейной лунки со сгущением в окрестности кромки и у стенки. В отличие от кромочной сетки в MBG3 эта криволинейная сетка обладает меньшими ошибками скоса. На дне лунки размещается “заплатка” прямоугольной формы в сечении xz, которая в вертикальном направлении согласуется с криволинейной поверхностью лунки и плоской границей выделенной подобласти над ней.

Следует отметить, что для различных типов расчетных сеток проведены исследования сеточной сходимости результатов. Выбранные в табл. 1 сетки являются локальными сетками, на которых сеточная сходимость была достигнута.

Таблица 1. Характеристики расчетных сеток

Сетки	Пакет	NNN в млн	Δxzm
MG	VP2/3	3.16	0.04
HG	StarCCM+	3.50	0.035
MBG3	VP2/3	3.12	0.05
MBG4	VP2/3	2.30	0.05

АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ

На рис. 2–6 и в табл. 2, 3 представлены некоторые из полученных результатов.

Показанные в табл. 2 и 3 численные прогнозы экстремальных величин продольной $u_{\max}$, $u_{\min}$ и поперечной $w_{\max}$, $w_{\min}$ составляющих локальной скорости течения, энергии турбулентности $k_{\max}$ и вихревой вязкости $\mu_{t\max}$, а также суммарного числа Нуссельта Nu_m на квадратном контрольном участке размером 6 × 6 нижней стенки с ОТЛ и коэффициента гидравлических потерь ζ, измеренного на проточных границах периодического модуля, сравниваются на сетках различного типа с разным количеством расчетных ячеек для моде-

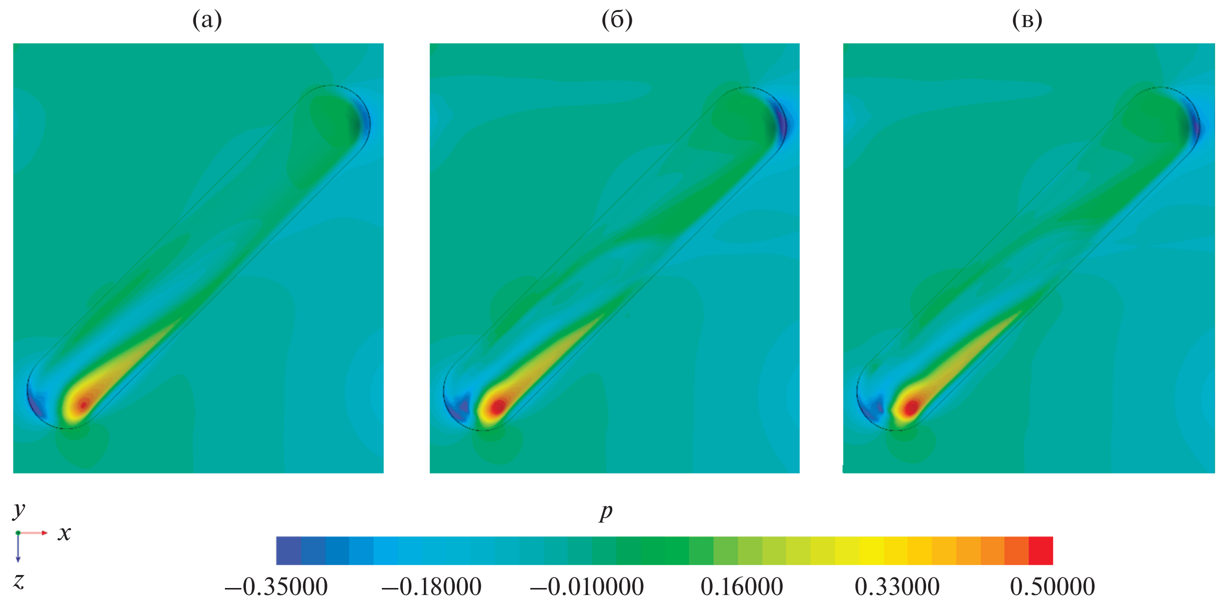


Рис. 2. Сравнение полей статического давления на стенке с лункой, рассчитанных с использованием моделей турбулентности *k*–ε-Realizable (а), SA (б), SST (в).

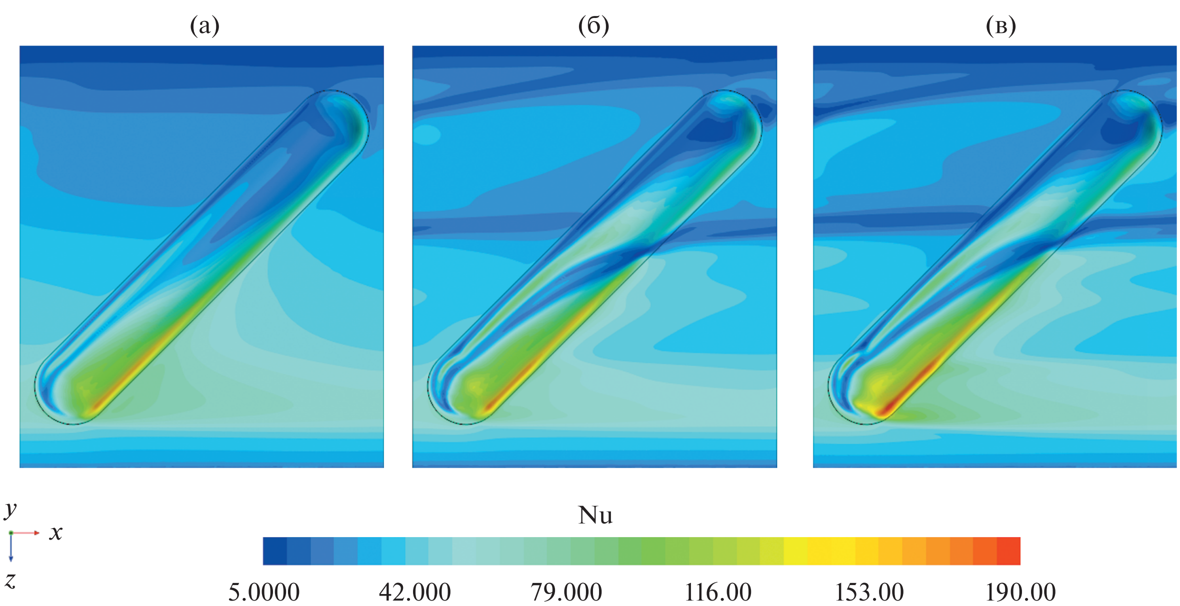


Рис. 3. Сравнение полей числа Нуссельта на стенке с лункой, рассчитанных с использованием моделей турбулентности *k*–ε-Realizable (а), SA (б), SST (в).

лей турбулентности и примененных пакетов. Для сопоставления в табл. 3 также приведены характеристики течения и теплообмена для плоскопараллельного канала.

Важно подчеркнуть, что представленные на рис. 2 и 3 картины полей статического давления и числа Нуссельта на нижней облуненной стенке периодического модуля, а также добавленные к ним на рис. 4 графические распределения *x*-й составляющей коэффициента трения *fx* и числа Нуссельта в срединном сечении ОТЛ, рассчитанные пакетом StarCCM+ с использованием различных полуэмпирических моделей турбулентности, качественно согласуются между собой.

Модели *k*–ε-Realizable, SA и SST (с поправкой Дурбина) одинаково показывают резкое торможение входящего в наклоненную под углом 45° внешнего потока во входной наветренной части ОТЛ.

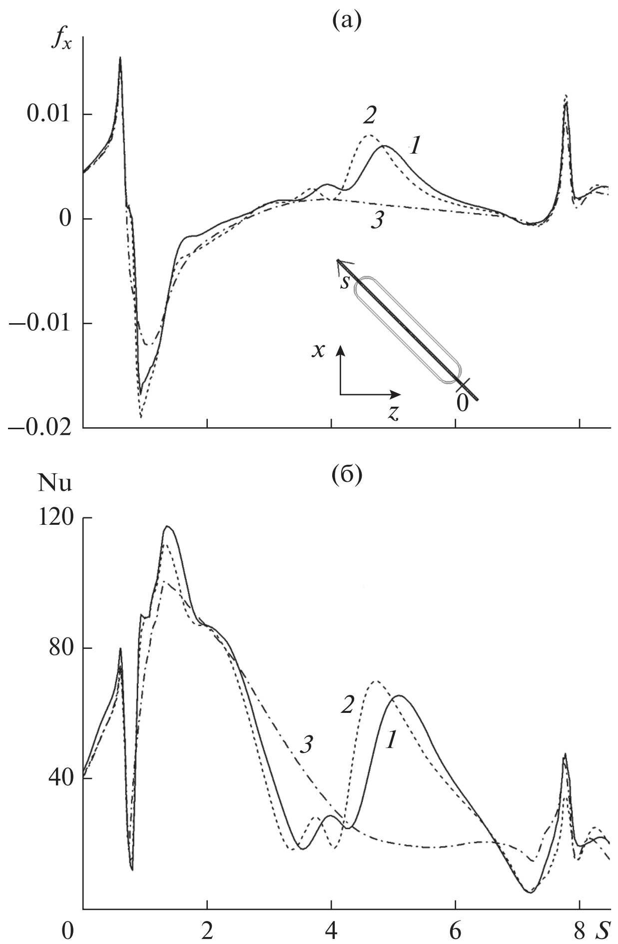


Рис. 4. Сравнение распределений x-компоненты относительного трения $f_x/f_{xpl}(S)$ (а) и $Nu/Nu_{pl}(S)$ (б) в продольном сечении наклоненной овально-траншейной лунки, рассчитанных с использованием различных моделей турбулентности: *1* – SA, *2* – SST, *3* – k–ε-Realizable.

В то же время на сферическом сегменте возникает зона отрицательного давления в месте формирования спиралеобразного торнадоподобного вихря. Зона разрежения также прогнозируется всеми моделями в следе за сферическим окончанием лунки. Пиковые тепловые нагрузки предсказываются на наветренной кромке ОТЛ. В передней части ОТЛ все модели показывают значительные уровни локальной теплоотдачи. Шлейф повышенных тепловых потоков регистрируется за этой частью ОТЛ в ближнем следе. В то же время падение теплового потока прогнозируется на подветренной кромке и в районе заднего сферического сегмента ОТЛ.

Однако наблюдаются и существенные качественные отличия прогнозов по модели k–ε-Realizable и двум остальным моделям. Как видно из рис. 2а, закрученный вихревой поток, рассчитанный по k–ε-Realizable-модели, не выходит из лунки, пока не достигнет заднего сферического сегмента. При этом модели SA и SST предсказывают ранний выход спиралевидной вихревой структуры из лунки (примерно на расстоянии 0.6 длины ОТЛ). Особенно четко этот свищ визуализируется по полям числа Нуссельта, показывая обусловленные им зоны низкой теплоотдачи (рис. 3б, 3в).

Анализ результатов, представленных на рис. 2–4 и в табл. 2, указывает на близость локальных, включая экстремальные величины, и интегральных численных прогнозов по моделям SST (с поправкой Дурбина) и SA. В то же время оказываются значительными количественные и даже качественные рассогласования с ними предсказаний по k–ε-Realizable. Так, в прогнозируемых распределениях $fx(S)$ и $Nu(S)$ отсутствует второй пик в центральной части ОТЛ, который воспроизводится двумя остальными моделями. Также резко ослабевает течение во внутренней отрывной зоне в переднем сферическом сегменте ОТЛ, а именно: значительно уменьшается u_{min} и растет f_{min}. Также падает интенсивность вторичного течения, определяемая $-w_{min}$.

Однако в целом прогнозируемая по k–ε-Realizable-модели тепловая эффективность мало отличается от предсказания по модели SA и в пределах 10% уступает Nu_m, оцененной по SST-модели. Кстати, гидравлические потери по k–ε-Realizable-модели оказались примерно на 5% ниже, чем прогнозы по двум другим моделям. Важно отметить, что максимальная вихревая вязкость по k–ε-Realizable-модели (табл. 2) в полтора раза превосходит аналогичные величины для остальных моделей. Очевидно, что генерация избыточной вихревой вязкости в k–ε-Realizable-модели способствует перестройке течения в ОТЛ и приводит к отсутствию выброса спиралевидного вихря из нее.

Таблица 2. Сравнение интегральных теплогидравлических характеристик и экстремальных параметров течения, рассчитанных с помощью различных моделей турбулентности

	Nu_m	$10^2\zeta$	u_{max}	u_{min}	w_{min}	w_{max}	10^2k_{max}	$10^3\mu_{tmax}$
SST	43.34	2.26	1.46	−0.76	−1.2	0.42	4.86	5.02
SA	40.9	2.26	1.46	−0.77	−1.21	0.39	–	4.9
k–ε	39.5	2.14	1.44	−0.54	−1.08	0.34	9.48	7.32

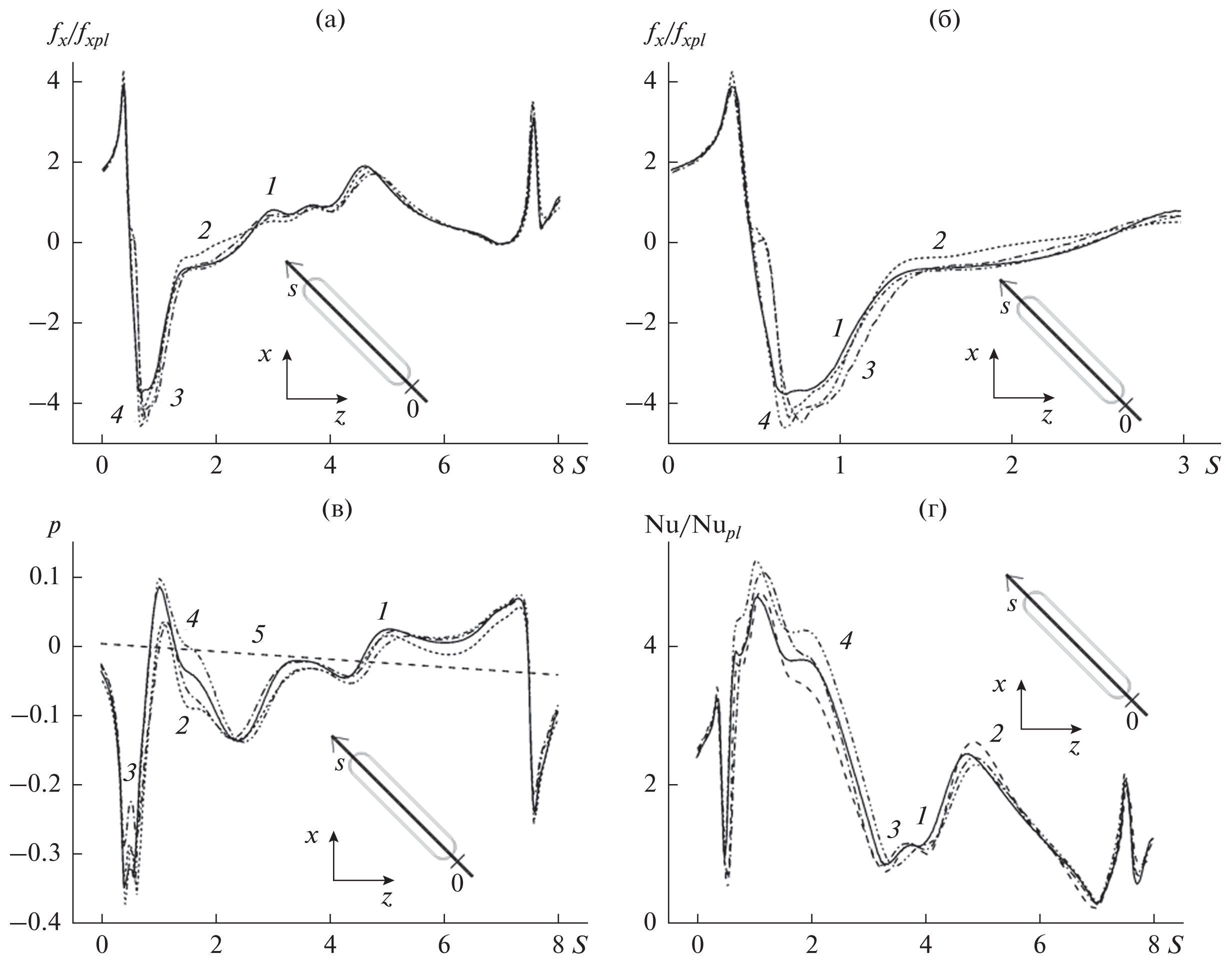


Рис. 5. Сравнение распределений x-компоненты относительного трения $f_x/f_{xpl}(S)$ (а), (б), статического давления $p(S)$ (в) и относительного числа Нуссельта $\mathrm{Nu}/\mathrm{Nu}_{pl}(S)$ (г) в продольном сечении наклоненной овально-траншейной лунки, рассчитанных с использованием различных сеток: *1* – MG, *2* – HG, *3* – MBG3, *4* – MBG4, *5* – плоскопараллельный канал; (б) – укрупненный фрагмент картины (а).

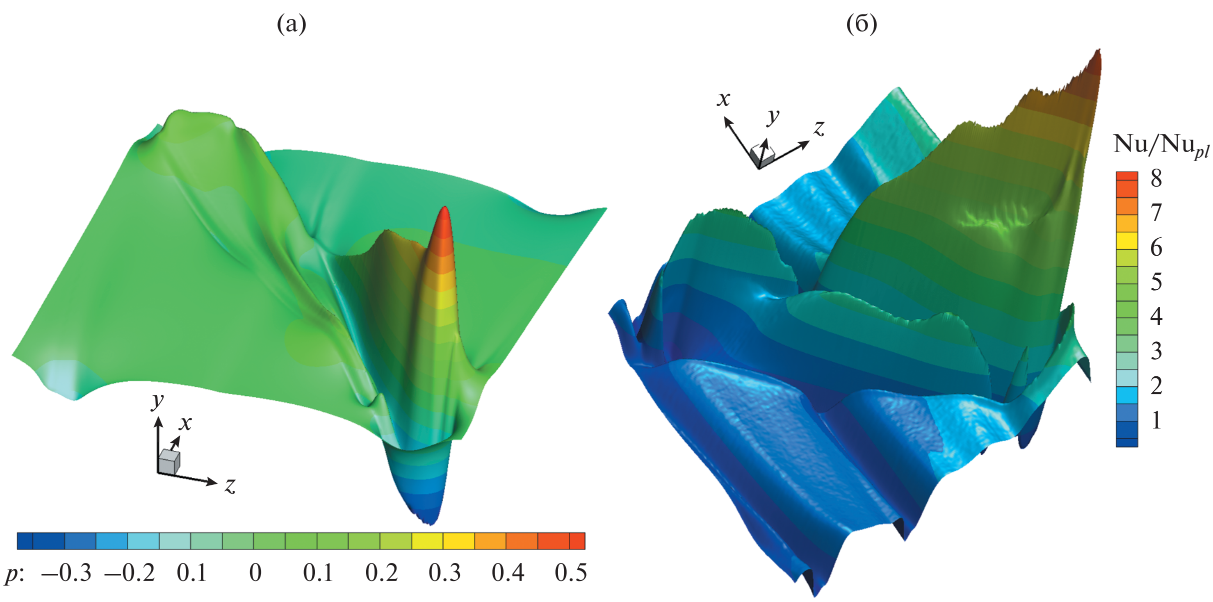


Рис. 6. Картины полей статического давления (а) и относительного числа Нуссельта (б) на стенке канала с наклоненной овально-траншейной лункой.

Таблица 3. Сравнение интегральных теплогидравлических характеристик и экстремальных параметров течения, рассчитанных на различных сетках и пакетах

Сетки	Nu_m	$10^2\zeta$	u_{max}	u_{min}	w_{min}	w_{max}	$10^2 k_{max}$	$10^3 \mu_{tmax}$
MG	44.00	2.18	1.455	−0.726	−1.227	0.384	5.22	5.13
HG	43.34	2.26	1.46	−0.661	−1.200	0.420	4.86	5.02
MBG3	44.08	2.29	1.456	−0.784	−1.230	0.461	5.42	5.17
MBG4	45.07	2.30	1.460	−0.681	−1.248	0.441	4.54	5.04
Plate	25.59	1.59	1.19	0	−0.0002	0.0002	1.00	4.30

На рис. 5 сравниваются распределения трения и числа Нуссельта, отнесенные к соответствующим величинам на плоской стенке, а также статического давления вдоль срединного сечения наклоненной ОТЛ для различных сеточных структур и пакетов при использовании модифицированных SST-моделей. Несмотря на некоторое рассогласование численных прогнозов, наиболее ярко выраженное во входной части ОТЛ (примерно от $S = 1.5$ до 2.5) в области сложного вихревого течения за зоной отрыва, в целом наблюдается количественное их согласие. Особенности использованных сеточных структур в определенной мере объясняют характер возникших рассогласований. Так, моноблочная структурированная сетка с квадратными по осям x–z расчетными ячейками (кривые *1*) предсказывает более высокое значение $(f/f_{pl})_{min}$ и менее низкое – $(Nu/Nu_{pl})_{max}$ в зоне отрыва, чем остальные сетки. Это свидетельствует о недостаточной разрешимости области высоких градиентов скорости в кромочной области. В то же время сетка MBG3 с косоугольной кромочной сеткой несколько завышает давление в зоне разрежения на сферическом входном сегменте ОТЛ (кривая *3* на рис. 5в). Следует отметить, что на всех сетках хорошо воспроизводятся две впадины $(f/f_{pl})_{min}$. Первый минимум располагается на плоской стенке перед лункой, а второй – внутри нее на сферическом сегменте.

В целом распределения характеристик в срединном сечении ОТЛ на рис. 5, данные в табл. 3, а также поля давления и относительного числа Нуссельта, показанные на рис. 6, позволяют сделать несколько выводов.

1. Тепловая эффективность облуненного периодического модуля растет в 1.72 раза, а гидравлические потери – в 1.42 раза. Ускорение потока в ядре канала прогнозируется на уровне 23%. Максимальная величина скорости возвратного течения составляет примерно 0.73 от среднемассовой скорости, а наибольшая величина скорости вторичного течения на 3% превышает максимальную скорость потока в плоскопараллельном гладком канале. При переходе от гладкого к облуненному каналу максимум турбулентной энергии возрастает в пять раз, в то время как максимальный уровень вихревой вязкости растет только на 16%.

2. Аномальная интенсификация отрывного течения и теплообмена в наклоненной ОТЛ характеризуется достигнутым минимальным уровнем относительного трения, равным 4.5, и максимальным уровнем относительной теплоотдачи порядка 5.

Статическое давление в зоне торможения на наветренной кромке ОТЛ превосходит уровень 0.5, в то время как в близко расположенной окрестности формирования торнадоподобного вихря на входном сферическом сегменте отрицательное давление падает до минимума порядка −0.35 (рис. 6а). Пик положительного давления довольно острый, как показано на рис. 6а, и за ним по сглаженной кромке следует гребень высокого давления с вершиной порядка 0.3. Пики давления (с величиной порядка 0.1) и относительной теплоотдачи, достигающей 5, приходятся на зону резкого возрастания x-компоненты относительного трения f_x/f_{xpl} ($S \sim 1.3$). За локальным максимумом давление снижается до −0.15, а затем волнообразно повышается к заднему сферическому сегменту наклоненной ОТЛ, как видно из рис. 5в и рис. 6а. В районе $S = 5$ совпадают локальные максимумы давления, относительных трения и теплоотдачи, причем $(f_x/f_{xpl})_{max}$ и $(Nu/Nu_{pl})_{max}$ оказываются порядка 2 и 2.5 соответственно. Следует отметить, что в районе $S = 3.5$ прогнозируется незначительный локальный максимум Nu/Nu_{pl}, соответствующий локальному максимуму статического давления. На задней кромке ОТЛ резко повышается f_x/f_{xpl}, доходя до 3.5, падает давление (до −0.25) и повышается Nu/Nu_{pl} (до 2 раз).

3. Зоны повышения теплоотдачи в ОТЛ рельефно показаны на рис. 6б. Гребень повышения относительной теплоотдачи на наветренной кромке лунки демонстрирует высокие (порядка 3–8) величины в довольно узкой области. Однако и внутри лунки возникает весьма протяженный (занимающий примерно 2/3 длины ОТЛ) гребень с высотами, доходящими до 4.5. После его завершения на наветренной кромке образуется гребень примерно такой же высоты, простирающийся до задней оконечности ОТЛ. Также следует отме-

тить локальный пик относительной теплоотдачи (порядка 3), совпадающий с пиком давления на подветренной стороне входной части наклоненной ОТЛ.

При рассмотренной ориентации ОТЛ с наклоном справа налево интенсификация теплообмена происходит на правой стороне периодического модуля, а слева наблюдаются обширные зоны с незначительным ростом теплоотдачи. Также в самой лунке и в области распространения выходящего из нее спиралевидного вихря теплоотдача оказывается ниже, чем на стенке плоскопараллельного канала. Однако интегральные характеристики тепловой и теплогидравлической эффективности узкого канала с однорядными ОТЛ выше, чем у их сферических аналогов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Уточнено распределение давления, относительного трения и теплоотдачи в срединном сечении наклоненной под углом 45° овально-траншейной лунки глубиной 0.3 в однорядном пакете с шагом 6 на стенке узкого канала шириной 7 и высотой 1 на стабилизированном гидродинамическом участке течения воздуха при $Re = 10^4$. В расчетах использовались достаточно подробные (от 2 до 4 млн ячеек) сетки различной топологии (моноблочные, структурированные и неструктурированные с гексагональными ячейками, многоблочные с пересечением фрагментарных сеток), различные модели турбулентности (k–ε-Realizable, SA, SST с поправками Дурбина и Роди–Лещцинера–Исаева) и пакеты прикладных программ (SratCCM+ и VP2/3). Обнаружено общее количественное согласие распределений и объяснены зональные рассогласования. Акцентировано внимание к зоне низкого давления в сферическом сегменте с уровнем –0.35. Отрицательное относительное трение в этой зоне достигает минимума величиной –4.5, а относительная теплопередача превышает 5.

2. Обнаружено, что прогнозируемая по k–ε-Realizable-модели тепловая эффективность почти не отличается от предсказания по модели SA и в пределах 10% уступает значению Nu_m, оцененному по SST-модели с поправкой Дурбина. Гидравлические потери по k–ε-Realizable-модели оказались примерно на 5% ниже, чем прогнозы по двум другим моделям. В то же время установлено качественное различие предсказаний локальных характеристик по разным полуэмпирическим моделям. Так, в прогнозируемых по k–ε-Realizable распределениях $fx(S)$ и $Nu(S)$ отсутствует второй гребень повышения в центральной части ОТЛ, который хорошо воспроизводится двумя остальными моделями. Отмечается близость локальных, включая экстремальные величины, и интегральных численных прогнозов по моделям SST (с поправкой Дурбина) и SA.

3. Экстремальные величины декартовых составляющих скорости возвратного течения достигают величин порядка 0.7 среднемассовой скорости, а для вторичного течения они несколько (на 3%) превышают максимальную скорость потока в плоскопараллельном канале (1.19). Тепловая эффективность облуненного периодического модуля растет в 1.72 раза, а гидравлические потери – в 1.42 раза. Ускорение потока в ядре канала прогнозируется на уровне 23%.

4. Анализируются причины аномальной интенсификации отрывного течения и теплообмена в однорядной овально-траншейной лунке на стенке узкого канала, связанные с перепадом полного давления на ориентированной под углом к внешнему потоку вогнутой стенке между областью торможения на наветренной кромке (0.5) и зоной отрицательного давления (–0.35) на сферическом сегменте в месте генерации смерчеобразного вихря. Сочетание взаимодействия набегающего потока с профилированной стенкой и возникающей мощной, скрытой во впадине смерчеобразной вихревой структуры обеспечивает ранее ненаблюдаемый эффект аномальной интенсификации отрывного течения и теплообмена.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 19-19-00259.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Вихревые технологии для энергетики / Под общ. ред. Леонтьева А.И. М.: Изд. дом МЭИ, 2017. 500 с.
2. *Rashidi S., Hormozi F., Sunden B., Mahian O.* Energy Saving in Thermal Energy Systems Using Dimpled Surface Technology – A Review on Mechanisms and Applications // Appl. Energy. 2019. V. 259. P. 1491.
3. *Isaev S.A., Schelchkov A.V., Leontiev A.I., Gortyshov Yu.F., Baranov P.A., Popov I.A.* Tornado-like Heat Transfer Enhancement in the Narrow Plane-parallel Channel with the Oval-trench Dimple of Fixed Depth and Spot Area // Int. J. Heat Mass Transfer. 2017. V. 109. P. 40.
4. *Isaev S., Leontiev A., Chudnovsky Y., Popov I.* Vortex Heat Transfer Enhancement in Narrow Channels with a Single Oval-trench Dimple Oriented at Different Angles to the Flow // J. Enhanced Heat Transfer. 2018. V. 25. № 6. P. 579.
5. *Isaev S., Leontiev A., Chudnovsky Y., Nikushchenko D., Popov I., Sudakov A.* Simulation of Vortex Heat Transfer Enhancement in the Turbulent Water Flow in the Narrow Plane-parallel Channel with an Inclined Oval-trench Dimple of Fixed Depth and Spot Area // Energies. 2019. V. 12. № 7. Paper 1296.
6. *Исаев С.А., Леонтьев А.И., Корнев Н.В., Хассель Э., Чудновский Я.П.* Интенсификация теплообмена при ламинарном и турбулентном течении в узком канале с однорядными овальными лунками // ТВТ. 2015. Т. 53. № 3. С. 390.
7. *Исаев С.А., Леонтьев А.И., Мильман О.О., Судаков А.Г., Усачов А.Е., Гульцова М.Е.* Интенсификация теп-

лообмена при ламинарном вихревом течении воздуха в узком канале с однорядными наклоненными овальными лунками // ИФЖ. 2018. Т. 91. № 4. С. 1022.

8. *Isaev S.A., Leontiev A.I., Milman O.O., Popov I.A., Sudakov A.G.* Influence of the Depth of Single-row Oval-trench Dimples Inclined to Laminar Air Flow on Heat Transfer Enhancement in a Narrow Micro-channel // Int. J. Heat Mass Transfer. 2019. V. 134. P. 338.
9. *Isaev S., Gritckevich M., Leontiev A., Popov I.* Abnormal Enhancement of Separated Turbulent Air Flow and Heat Transfer in Inclined Single-row Oval-trench Dimples at the Narrow Channel Wall // Acta Astronautica. 2019. V. 163 (Part A). P. 202.
10. *Исаев С.А., Грицкевич М.С., Леонтьев А.И., Попов И.А., Судаков А.Г.* Аномальная интенсификация турбулентного отрывного течения в наклоненных однорядных овально-траншейных лунках на стенке узкого канала // ТВТ. 2019. Т. 57. № 5. С. 797.
11. *Исаев С.А., Грицкевич М.С., Леонтьев А.И., Мильман О.О., Никущенко Д.В.* Ускорение турбулентного потока в узком облуненном канале и интенсификация отрывного течения при уплотнении однорядных наклоненных овально-траншейных лунок на стенке // Теплофизика и аэромеханика. 2019. Т. 26. № 5. С. 697.
12. *Isaev S.A., Gritckevich M.S., Leontiev A.I., Milman O.O., Nikushchenko D.V.* Vortex Enhancement of Heat Transfer and Flow in the Narrow Channel with a Dense Packing of Inclined One-row Oval-trench Dimples // Int. J. Heat Mass Transfer. 2019. V. 145. 118737.
13. *Isaev S.A., Kornev N.V., Leontiev A.I., Hassel E.* Influence of the Reynolds Number and the Spherical Dimple Depth on the Turbulent Heat Transfer and Hydraulic Loss in a Narrow Channel // Int. J. Heat Mass Transfer. 2010. V. 53. Iss. 1–3. P. 178.
14. *Исаев С.А., Баранов П.А., Усачов А.Е.* Многоблочные вычислительные технологии в пакете VP2/3 по аэротермодинамике. Саарбрюкен: LAP Lambert Acad. Publ., 2013. 316 с.
15. *Isaev S., Baranov P., Popov I., Sudakov A., Usachov A., Guvernyuk S., Sinyavin A., Chulyunin A., Mazo A., Demidov D., Dekterev A., Gavrilov A., Shebelev A.* Numerical Simulation and Experiments on Turbulent Air Flow around the Semi-circular Profile at Zero Angle of Attack and Moderate Reynolds Number // Computers and Fluids. 2019. V. 188. P. 1.
16. *Shih T.H., Liou W.W., Shabbir A., Yang Z.D., Zhu J.* A New k–ε Eddy Viscosity Model for High Reynolds Number Turbulent Flows // Comput. Fluids. 1995. V. 24. № 3. P. 227.
17. *Wolfstein M.* The Velocity and Temperature Distribution in One-dimensional Flow with Turbulence Augmentation and Pressure Gradient // Int. J. Heat Mass Transfer. 1969. V. 12. P. 301.
18. *Durbin P.A.* On the k–e Stagnation Point Anomaly // Int. J. Heat Fluid Flow. 1996. V. 17. P. 89.
19. *Spalart P.R., Allmaras S.R.* A One-equation Turbulence Model for Aerodynamic Flows // AIAA-92-0439. 1992.
20. *Dacles-Mariani J., Zilliac G., Chow J.S., Bradshaw P.* Numerical/Experimental Study of a Wingtip Vortex in the near Field // AIAA J. 1995. V. 33. № 9. P. 1561.
21. *Venkatakrishnan V.* Convergence to Steady State Solutions of the Euler Equations on Unstructured Grids with Limiters // J. Comput. Phys. 1995. V. 118. № 1. P. 120.
22. *Weiss J.M., Maruszewski J.P., Smith W.A.* Implicit Solution of Preconditioned Navier–Stokes Equations Using Algebraic Multigrid // AIAA J. 1999. V. 37. № 1. P. 29.
23. *Terekhov V., Kalinina S., Mshvidobadze Yu.* Heat Transfer Coefficient and Aerodynamic Resistance on a Surface with a Single Dimple // Enhanced Heat Transf. 1997. V. 4. P. 131.
24. *Abo Amsha K., Craft T.J., Iacovides H.* Computational Modelling of the Flow and Heat Transfer in Dimpled Channels // Aeronaut. J. 2017. V. 121. Iss. 1242. P. 1066.
25. *Kwon H.G., Hwang S.D., Cho H.H.* Measurement of Local Heat/Vass Transfer Coefficients on a Dimple Using Naphthalene Sublimation // Int. J. Heat Mass Transfer. 2011. V. 54. P. 1071.
26. *Rao Y., Li B., Feng Y.* Heat Transfer of Turbulent Flow over Surfaces with Spherical Dimples and Teardrop Dimples // Exp. Therm. Fluid Sci. 2015. V. 61. P. 201.

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР, 2021, том 59, № 1, с. 126–132

УДК 536.524

ВЛИЯНИЕ ПАССИВНОГО ВОЗМУЩЕНИЯ НА СТРУКТУРУ ТЕЧЕНИЯ И ТЕПЛООБМЕН В ОТРЫВНОЙ ОБЛАСТИ ЗА ОБРАТНОЙ СТУПЕНЬКОЙ

© 2021 г. А. В. Барсуков[1, *], В. В. Терехов[1, 2], В. И. Терехов[2]

[1]Новосибирский государственный университет, г. Новосибирск, Россия

[2]Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, г. Новосибирск, Россия

*E-mail: andreybarsukov96@gmail.com

Поступила в редакцию 28.03.2020 г.
После доработки 28.03.2020 г.
Принята к публикации 18.06.2020 г.

Представлены результаты численного исследования турбулентного отрывного течения и теплообмена в канале с внезапным расширением при наличии пассивного возмущения, которое создавалось с помощью ребра-вихрегенератора. Высота ребра и его местоположение перед уступом изменялись в широких пределах. Результаты моделирования показали сильное влияние вихрегенератора на поле турбулентной энергии и коэффициент трения. Значение коэффициента теплоотдачи при этом изменяется несущественно, что говорит о консервативности теплообмена к генерируемым ребром возмущениям. Обсуждаются причины такого поведения динамических и тепловых характеристик, представлено сопоставление результатов расчета с экспериментальными данными, подтверждающее их качественное согласие.

DOI: 10.31857/S0040364421010026

ВВЕДЕНИЕ

Изучению методов управления характеристиками течения и тепломассопереносом в отрывных потоках в последнее время уделяется все более пристальное внимание. Исследования в этой области инициированы, прежде всего, важными практическими приложениями в энергетике, химических технологиях и других отраслях техники. Особый интерес при этом вызывают пассивные методы управления в силу простоты их практической реализации и удобства эксплуатации в составе теплообменного оборудования. В зависимости от конкретного предназначения подобные методы позволяют дополнительно интенсифицировать тепломассообмен, сократить либо, наоборот, расширить размер рециркуляционной зоны и изменять уровень гидравлических потерь. Подробную информацию о потенциальных возможностях пассивных методов управления отрывными течениями можно найти в работах [1–4].

Наиболее простой схемой управления течением является установка вихрегенератора, в частности тонкого ребра, перед отрывным обтеканием обращенного против потока уступа. Подобная классическая схема модификации отрывного течения изучалась в ряде работ экспериментально [5–8] и численно [9, 10]. В работе [11] управление потоком осуществлялось за счет установки ребра на верхней стенке канала напротив уступа. В упомянутых исследованиях отмечается чрез вычайно сложная картина течения, являющаяся результатом взаимодействия двух отрывных потоков с сильно различающимися масштабами: большим – за уступом и малым – за ребром-вихрегенератором. В зависимости от соотношения их размеров, местоположения ребра, степени расширения канала, а также ряда иных факторов возможно существование различных сценариев развития отрывных течений. Так, по данным [5, 7, 9], установка ребра непосредственно на кромке уступа значительно турбулизирует слой смешения после отрыва, увеличивая размер рециркуляционной зоны, и тем самым смещает точку присоединения вниз по потоку. Если же ребро располагается на расстоянии примерно $X/\Delta \sim 10$–15 до кромки уступа и оторвавшийся за ребром поток успевает присоединиться к стенке, то воздействие его на глобальный отрыв за ступенькой значительно уменьшается, а размер отрывного пузыря становится минимальным и интенсивность его ослабевает. Подобные тенденции имеют место и для тепловой картины процесса взаимодействия отрывных потоков с сильно отличающимися масштабами, когда небольшие по интенсивности возмущения могут приводить к заметной перестройке тепловых полей и распределений коэффициентов теплоотдачи по теплообменной поверхности [12]. Еще более сложными и многофакторными особенностями обладают течения при установке трехмерных преград – вихрегенераторов (табов) [13, 14], которые с практической точки зрения являются более приемлемыми в качестве интенсификаторов теплообмена, нежели двумерные.

Анализ современного состояния проблемы пассивного управления отрывными течениями показал, что в этой области сделаны первые шаги, которые свидетельствуют о больших потенциальных возможностях подобных методов. Совершенно очевидно, что исследования в данном направлении нуждаются в углублении и детализации, причем не только структуры течения, но и тепломассопереноса. Данная работа является развитием программы исследований процесса интерференции отрывных потоков с различающимися масштабами [7, 8, 12, 14]. Здесь представлены результаты численных исследований турбулентного течения и теплообмена при вариации геометрических параметров, таких как размер ребра, его местоположение и степень расширения канала. Результаты численного анализа сопоставляются как с собственными экспериментальными данными, так и с результатами других авторов.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ. МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ И ТЕСТИРОВАНИЕ

Схема течения показана на рис. 1. В целом она подобна таковой при проведении экспериментальных исследований [7, 8]. В плоском, неограниченном в поперечном направлении канале высотой $h_0 = 21$ мм, на варьируемом в расчетах расстоянии L_0 располагается обратный уступ с размером ступеньки $H = 9$ мм, так что степень расширения канала составляет $ER = h_1/h_0 = 1.43$. На нижней стенке подводящего канала устанавливается вихрегенератор в виде тонкого ребра толщиной $e = 3$ мм и различной высоты $\Delta = 1.5$–6 мм, при этом отношение линейных масштабов преграды и уступа изменялось в пределах $\Delta/H = 1/6–2/3$. Расстояние между ребром и кромкой уступа также варьировалось в максимально возможных пределах от $S = 0$ (на краю уступа) и $S \to \infty$ (отсутствие ребра).

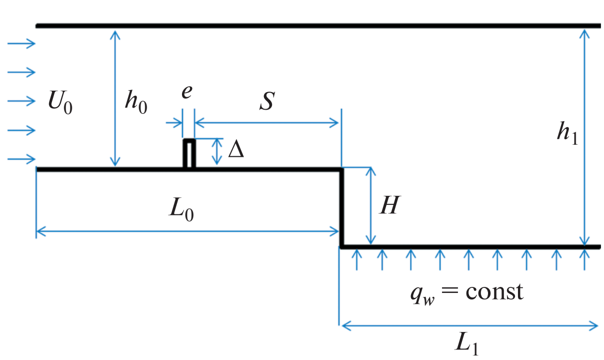


Рис. 1. Схема течения.

Все стенки канала были адиабатическими, за исключением нижней за основанием уступа, к которой подводился постоянный по длине тепловой поток. Течение считается несжимаемым, теплофизические свойства – постоянными. Число Рейнольдса, рассчитанное по высоте уступа, полагалось неизменным и равным Re = 5000.

Численное моделирование вышеописанного течения проводилось с помощью пакета OpenFOAM. Физико-математическая модель основывалась на двумерных осредненных по Рейнольдсу уравнениях неразрывности, движения и энергии для несжимаемой жидкости. Для замыкания этой системы в настоящей работе использовалась SST k–ω-модель турбулентности, которая достаточно хорошо описывает отрывные течения [15, 16]. Уравнение переноса энергии замыкалось простой градиентной моделью с эффективным коэффициентом температуропроводности, определяемым постоянным “турбулентным” числом Прандтля, равным 0.8.

Интегрирование всех уравнений, входящих в математическую модель, проводилось с помощью метода контрольного объема второго порядка точности по пространству в стационарной (итерационной) постановке и солвера simpleFoam из пакета OpenFOAM.

Для каждой рассмотренной в работе геометрии был проведен тщательный подбор вычислительной сетки, которая в настоящей задаче была структурированной прямоугольной. Критериями нахождения оптимального количества ячеек были расстояние первой ячейки от стенки не более 1 в единицах “закона стенки”, наличие не менее десяти ячеек в вязком подслое и “выход” на неизменное решение по мере использования все более сгущающихся сеток. В результате использования указанных критериев, характерное число ячеек сетки составляло 10^5.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Визуализация течения. Результаты визуализации течения демонстрируются на рис. 2 и 3. Как видно на рис. 2, где показано поле продольной компоненты скорости, место расположения вихрегенератора сильно влияет на структуру течения. Если при отсутствии ребра (рис. 2а) рециркуляционное течение находится строго в “тени” за уступом, то при наличии вихрегенератора (рис. 2б и 2в) из-за усиления процессов струйного смешения поперечный размер его заметно возрастает. Увеличивается также и продольный масштаб отрывного пузыря, что наиболее ярко проявляется при установке ребра непосредственно на кромке уступа перед отрывом потока.

Распределение кинетической энергии турбулентности при идентичных с рис. 2 условиях представлены на рис. 3. Можно отметить те же

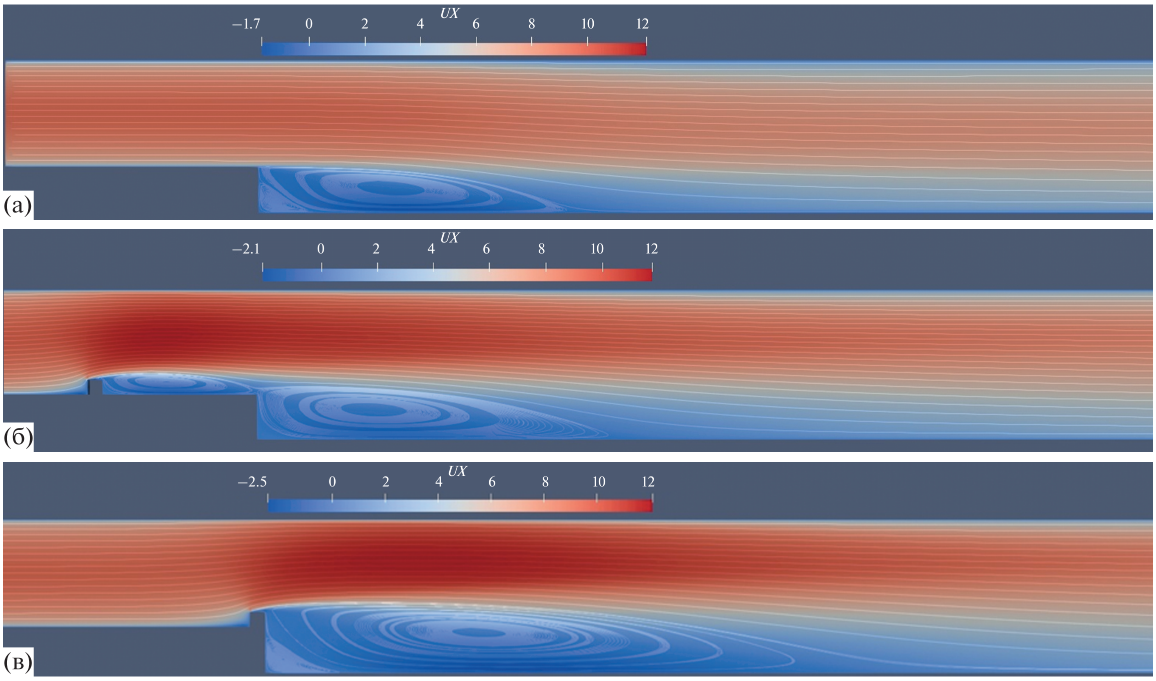


Рис. 2. Поля продольной компоненты скорости при изменении местоположения ребра-вихрегенератора, Re = 5000, $\Delta/H = 0.33$: (а) $S/\Delta \to \infty$, (б) 10.33, (в) 0.

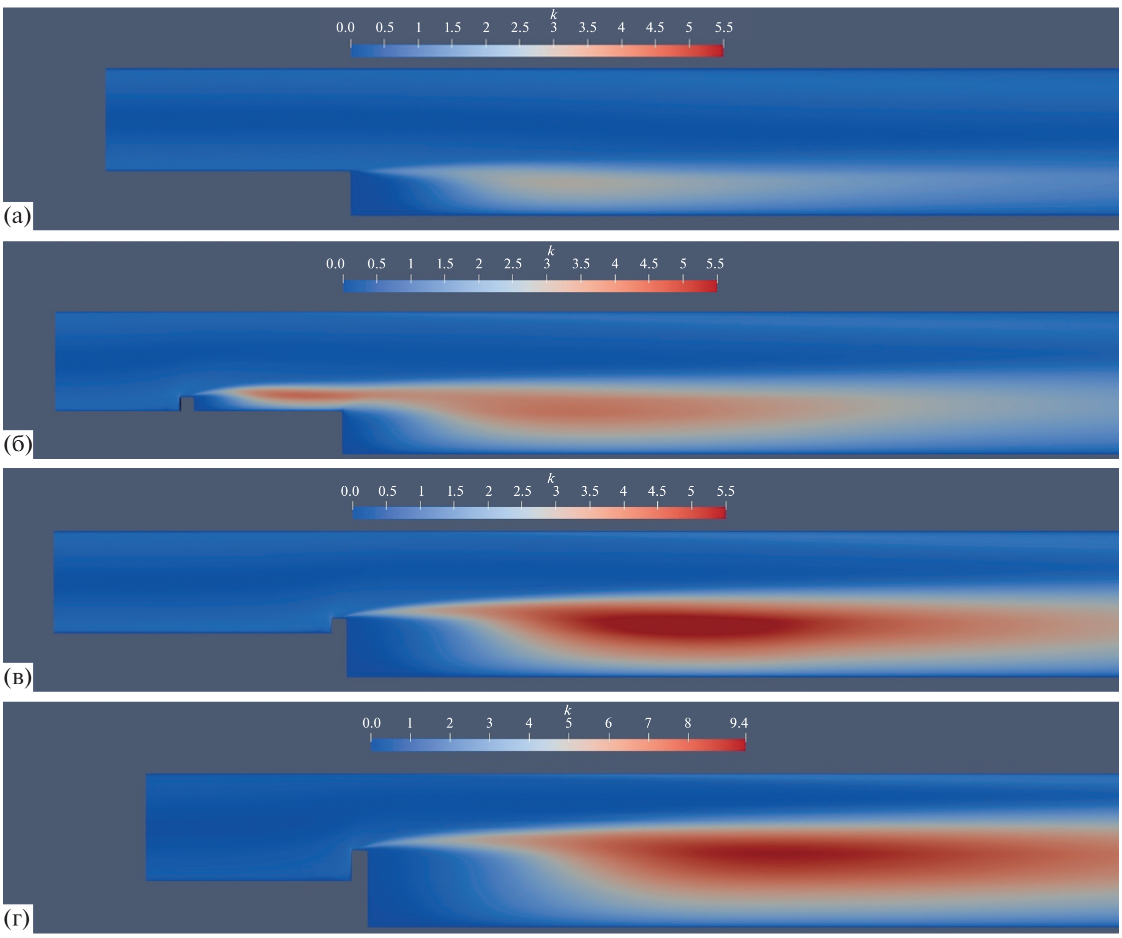


Рис. 3. Кинетическая энергия турбулентности при различном местоположении вихрегенератора, Re = 5000, $\Delta/H = 0.33$: (а) $S/\Delta \to \infty$; (б) 10.33; (в) 0; (г) $\Delta/H = 0.66$, $S/\Delta = 0$.

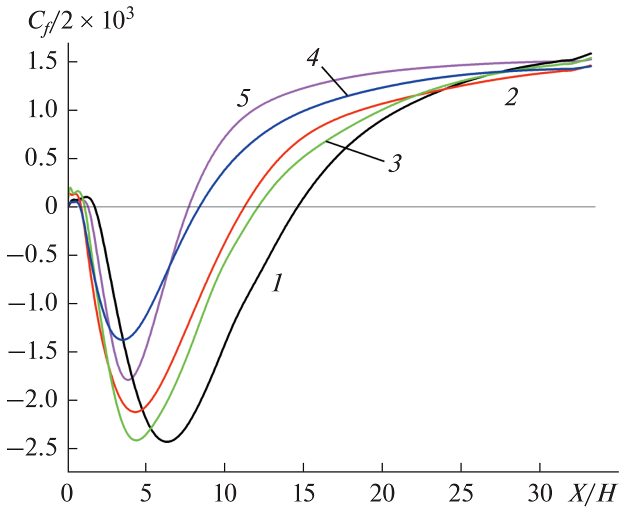


Рис. 4. Распределение трения на поверхности в отрывной области при вариации местоположения вихрегенератора, Re = 5000, $\Delta/H = 0.33$: *1* – $S/\Delta = 0$, *2* – 6.66, *3* – 13.33, *4* – 16.66, *5* – ∞.

особенности формирования поля течения, что и на картинах осредненной компоненты скорости, изображенных на рис. 2. Действительно, область повышенной турбулентности при отрыве потока без возмущений (рис. 3а) занимает небольшое пространство непосредственно в слое смешения оторвавшегося потока с рециркуляционной зоной. Интенсивность турбулентности здесь относительно невелика, так же как и ее протяженность вниз по потоку.

Принципиально изменяется картина турбулентных пульсаций в случае, когда на отрыв за уступом оказывает влияние вихрегенератор. Если ребро расположено на некотором расстоянии от кромки уступа (рис. 3б), то оно само становится источником турбулентности, и эта область является достаточно продолжительной. Как отмечается в экспериментальных работах [5, 7, 8] степень влияния этого вихревого следа на отрывное течение за уступом зависит преимущественно от того, происходит ли его проникновение в слой смешения за уступом. Если ребро достаточно далеко расположено от кромки уступа, как, например, на рис. 3б, то в этом случае влияние возмущений кардинально не отражается на структуре поля турбулентности и лишь незначительно повышает турбулентную энергию в области рециркуляции течения.

Совершенно иная картина наблюдается при расположении ребра непосредственно перед отрывом потока (рис. 3в). Хорошо видно, что область с высоким уровнем турбулентной энергии расширяется как в продольном, так и поперечном направлениях. При установке более высокого ребра $\Delta/H = 0.66$ возмущенная высокотурбулентная зона занимает большую часть канала как в продольном, так и поперечном направлениях, что наглядно демонстрируется на рис. 3г. Очевидно, что отмеченные особенности формирования структуры течения будут заметны на размерах отрывной области, координате точки повторного присоединения потока, а также интенсивности теплообмена.

Поверхностное трение. Координата точки присоединения. Распределение коэффициента трения на нижней поверхности канала, начиная от основания уступа, при различном удалении ребра-вихрегенератора от точки отрыва потока S/Δ представлено на рис. 4. Предельными случаями расположения вихрегенератора являются $S/\Delta = 0$, когда ребро установлено на кромке ступеньки, и $S/\Delta \to \infty$, когда ребро-вихрегенератор отсутствует. Для промежуточных значений S/Δ все расчетные линии располагаются в диапазоне между ними.

Наличие вихрегенератора сильно влияет на величину трения на поверхности. Так, в области рециркуляционного течения, где коэффициент трения принимает отрицательное значение ($C_f < 0$), для случая установки ребра на кромке его абсолютное значение практически в два раза выше, чем в канале без вихрегенератора. Столь сильное изменение касательных напряжений говорит об увеличении интенсивности вихревых обратных токов в рециркуляционной зоне. Однако далее вниз по течению отмеченное различие в распределении коэффициента трения при вариации параметра S/Δ достаточно быстро вырождается и при $X/H > 25$ вследствие релаксационных процессов все расчетные данные располагаются близко друг от друга.

Для отрывных течений одним из характерных параметров является расстояние X_r от точки отрыва потока до повторного его присоединения. Это расстояние примерно соответствует продольному размеру отрывного пузыря. Координата точки присоединения определяется условием отсутствия касательных напряжений на стенке $C_f = 0$ и легко определяется по данным рис. 4. Результаты расчетов величины X_r/H в зависимости от степени удаления ребра от кромки уступа S/Δ и при различной высоте ребер Δ/H изображены на рис. 5. Отметим основные особенности поведения параметра X_r/H.

Если ребро расположено достаточно далеко от точки отрыва или отсутствует ($S/\Delta \to \infty$), масштаб рециркуляционной зоны становится постоянным и не зависящим от высоты ребра $X_r/H \sim 8$. Причем эта величина коррелирует с имеющимися в литературе экспериментальными данными [1, 8]. По мере приближения ребра к кромке уступа точка присоединения смещается вниз по потоку, тем самым увеличивая размер отрывного пузыря. Этот эффект значительно усиливается для высоких ребер, и, как видно из рис. 5, максимально продольный масштаб отрывной зоны может увеличиться почти в три раза по сравнению со случаем обтекания гладкого уступа.

На рис. 5 представлены также результаты измерений масштаба рециркуляционной зоны, проведенных в [7], а также численных исследований [9]. Можно отметить их качественное согласие с результатами настоящих расчетов, заключающееся в увеличении размера отрывной зоны по мере приближения вихрегенератора к точке отрыва потока за ступенькой. Однако количественного совпадения эксперимента и расчетов получить не удалось. Экспериментальные данные дают заниженные значения величины X_r/H по сравнению с расчетными. Объяснить сейчас причину такого несоответствия не представляется возможным. Это может быть вызвано как погрешностями эксперимента, так и несовершенством моделей турбулентности при численных исследованиях. Еще одним важным фактором, осложняющим сопоставление настоящих результатов и данных указанных экспериментов, является то, что числа Рейнольдса в расчетах и эксперименте отличались между собой. Кроме того, степень расширения канала и, как следствие, значительная величина продольного градиента давления, вызванного его расширением, могли быть различными в том и другом случаях.

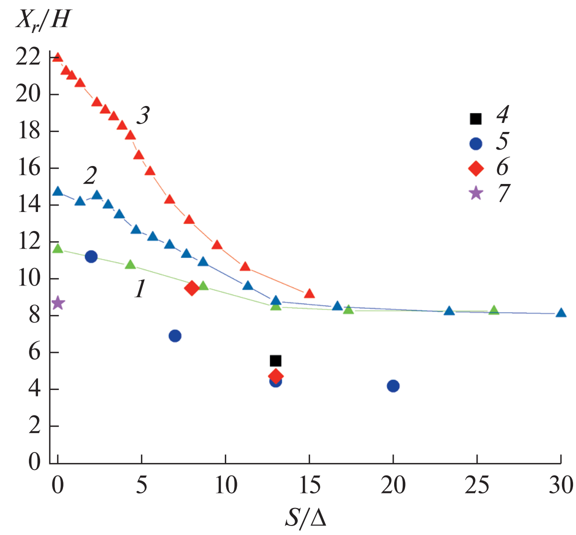


Рис. 5. Координата точки присоединения отрывного потока, расчет: *1* – $\Delta/H = 1/6$; *2* – 1/3; *3* – 2/3; *4* – [9], DNS, $\Delta/H = 0.3$, Re = 3000; эксперимент: *5* – [7], $\Delta/H =$ = 1/3, Re = 15500; *6* – [7], 2/3, 15500; *7* – [13], 0.06, 24000.

Теплообмен. Особенности влияния ребра-вихрегенератора на интенсивность турбулентного теплообмена можно проанализировать на рис. 6, где показано изменение локального числа Нуссельта $\mathrm{Nu} = \alpha H/\lambda$ по длине канала. Представленные данные соответствуют тем же условиям, что и для коэффициента трения на рис. 4.

Принципиальным отличием данных по конвективному теплообмену от трения на стенке является весьма слабое влияние вихрегенератора на величину коэффициента теплоотдачи. Действительно, если коэффициент трения в зоне рециркуляции при наличии ребра возрастает в несколько раз, то теплоотдача изменяется незначительно. Более наглядно этот вывод следует из рис. 7а, где представлены данные для максимального числа Нуссельта $\mathrm{Nu}_{\max}$ при установке вихрегенераторов различной высоты и вариации их расположения относительно точки отрыва. Для невысокого ребра (Δ/H = 0.33) интенсификации теплообмена практически не происходит, а для самого высокого (Δ/H = 0.66) рост теплоотдачи не превышает 25%. При этом наиболее интенсивно теплообмен происходит при установке вихрегенератора на расстояниях $S/\Delta = 5$–7 калибров по высоте ребра.

Тепловая картина отрывного течения за обратной ступенькой при наличии пассивного возмущения сильно отличается от динамической. Под-

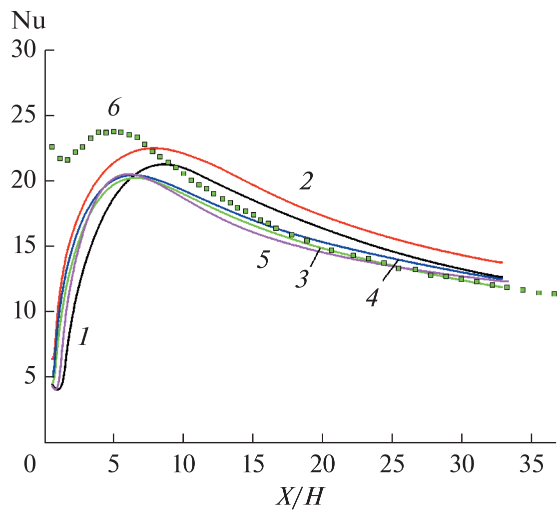


Рис. 6. Локальный теплообмен при отрыве потока и воздействии пассивного возмущения, расчет: *1* – $S/\Delta = 0$, *2* – 6.66, *3* – 13.33, *4* – 16.66, *5* – ∞; эксперимент [12]: *6* – $\Delta/H = 1/3$, Re = 5000.

тверждением этому служат данные по значению координаты максимальной теплоотдачи $X_{\max}/H$, которые изображены на рис. 7б. В экспериментальных исследованиях течения и теплообмена без вихрегенераторов установлено, что координаты точки присоединения и максимальной теплоотдачи, как правило, располагаются достаточно близко друг от друга [1]. Этого не наблюдается при отрыве потока с возмущением. При сравнении данных рис. 5 и 7б видно, что максимум теплообмена достигается задолго до точки повторно-

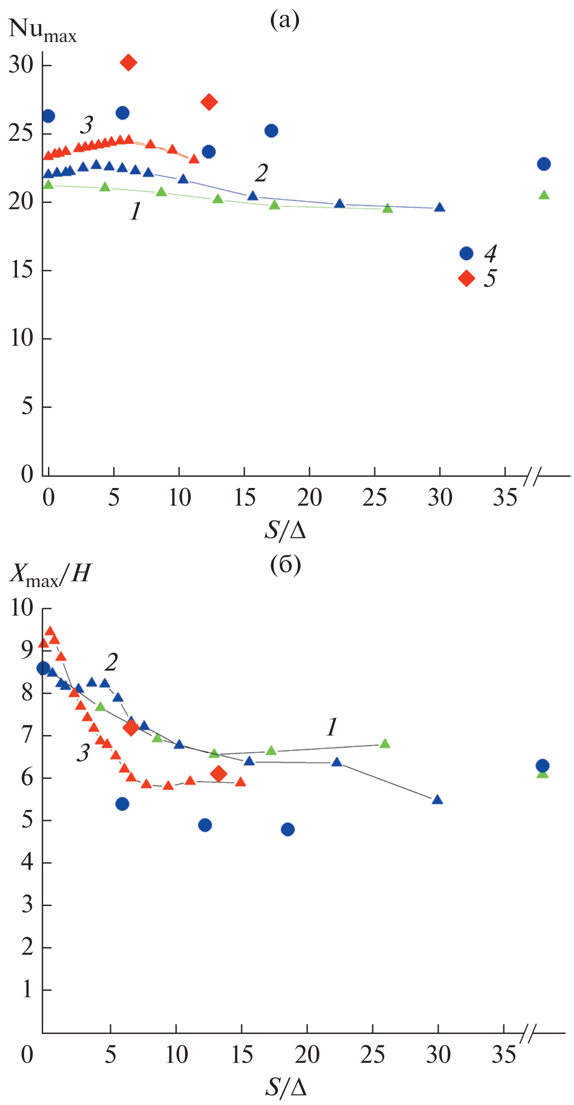


Рис. 7. Влияние вихрегенератора на максимальное число Нуссельта (а) и координату точки максимальной теплоотдачи (б), расчет: *1* – $\Delta/H = 1/6$, *2* – 1/3, *3* – 2/3; эксперимент [12]: *4* – $\Delta/H = 1/3$, Re = 5000; *5* – 2/3, 5000.

го присоединения. Особенно сильное отличие X_r от X_{max} имеет место при интенсивных воздействиях возмущений от вихрегенератора, когда ребро максимально приближено к кромке обратного уступа.

Отмеченная выше важная особенность поведения динамических и тепловых характеристик отрывных потоков при наличии пассивного возмущения является следствием сложного механизма проникновения крупномасштабных структур, генерируемых ребром, в сорванный с кромки уступа слой смешения. При этом причины консервативности пристенного теплообмена к подобным возмущениям требуют более детального рассмотрения.

Представленные на рис. 5–7 данные экспериментов по существу из единственной работы [12] демонстрируют те же самые тенденции, что и результаты численных исследований. В распределении локального числа Нуссельта (рис. 5) наибольшее расхождение расчета и эксперимента имеет место в непосредственной окрестности основания уступа, где трудности достоверных результатов как измерений, так и расчетов общеизвестны. Для величины максимума числа Нуссельта расчет дает заниженные результаты (рис. 7а), а для координаты его расположения, наоборот, завышает значение X_{max}/H (рис. 7б).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты численного исследования свидетельствуют о сильном отличии воздействия пассивных возмущений на гидродинамику и теплообмен отрывного течения за обратной ступенькой. Действительно, согласно данным расчета, продольный размер отрывного пузыря может изменяться в три раза в зависимости от места расположения вихрегенератора. О такой же тенденции говорят и результаты экспериментов. В области рециркуляции отрывного течения трение может вырасти более чем в два раза, если ребро-вихрегенератор располагается непосредственно перед отрывом потока.

Для теплообмена можно отметить его консервативность к воздействию подобных возмущений, поскольку максимальное их влияние на интенсивность теплопереноса не превышает 25%. При этом наибольший эффект увеличения теплоотдачи достигается при расположении ребра на расстоянии $S/\Delta = 5$–7 калибров до кромки уступа. Координата максимума числа Нуссельта не совпадает с точкой повторного присоединения потока и значительно сдвигается к основанию уступа.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 18-19-00161).

Обозначения. $C_f/2 = \tau_w/(\rho U_0^2)$ – коэффициент трения; e – ширина ребра, м; H – высота уступа, м; h_0 – высота канала до расширения, м; h_1 – высота канала после расширения, м; k – кинетическая энергия турбулентности, Дж; L_0 – длина канала перед уступом, м; L_1 – длина канала после уступа, м; $\mathrm{Nu} = q_w H/(\lambda(T_w - T_0))$ – число Нуссельта; q_w – тепловой поток, Вт/м^2; $\mathrm{Re} = UH/\nu$ – число Рейнольдса; S – расстояние от ребра до уступа, м; T_0 – температура потока в канале, °С; T_w – температура стенки, °С; U – скорость, м/с; u_i' – пульсация скорости, м/с; ν – кинематическая вязкость, м^2/с; ρ — плотность, кг/м^3; Δ — высота ребра, м; λ — коэффициент теплопроводности, Вт/(м K).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Терехов В.И., Богатко Т.В., Дьяченко А.Ю., Смульский Я.И., Ярыгина Н.И.* Теплообмен в дозвуковых отрывных потоках. Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2016. 239 с.
2. *Исаев С.А., Грицкевич М.С., Леонтьев А.И., Попов И.А., Судаков А.Г.* Аномальная интенсификация турбулентного отрывного течения в наклоненных однорядных овально-траншейных лунках на стенке узкого канала // ТВТ. 2019. Т. 57. № 5. С. 797.
3. *Вараксин А.Ю.* Обтекание тел дисперсными газовыми потоками // ТВТ. 2018. Т. 56. № 2. С. 282.
4. *Гапонов С.А., Терехова Н.М.* Тепломассообмен в сверхзвуковом пограничном слое как способ управления режимами обтекания // ТВТ. 2017. Т. 55. № 6. С. 733.
5. *Miau J.J., Lee K.C., Chen M.H., Chou J.H.* Control of Separated Flow by a Two-dimensional Oscillating Fence // AIAA J. 1991. V. 29. P. 1140.
6. *Gautier N., Aider J.-L.* Feed-forward Control of a Perturbed Backward-facing Step Flow // J. Fluid Mech. 2014. V. 759. P. 181.
7. *Терехов В.И., Смульский Я.И., Шаров К.А.* Экспериментальное исследование структуры отрывного течения за уступом при наличии пассивного возмущения // ПМТФ. 2016. Т. 57. № 1. С. 207.
8. *Дьяченко А.Ю., Смульский Я.И., Терехов В.И., Ярыгина Н.И.* Турбулентное перемешивание возмущений от малой преграды с отрывным сдвиговым слоем за уступом // Теплофизика и аэромеханика. 2015. Т. 22. № 6. С. 705.
9. *Neumann J., Wengle H.* DNS and LES of Passively Controlled Turbulent Backward Facing Step Flow // Flow, Turbul. Combust. 2003. V. 71. P. 297.
10. *Neumann J., Wengle H.* Coherent Structures in Controlled Separated Flow over Sharp-edged and Rounded Steps // J. Turbulence. 2004. V. 5. № 22. 14 p.
11. *Kumar S., Vengadesan S.* Control of Separated Fluid Flow and Heat Transfer Characteristics over a Backward Facing Step // Numer. Heat Transfer. Part A. 2018. V. 73. № 6. P. 366.
12. *Терехов В.И., Смульский Я.И.* Экспериментальное исследование теплообмена при взаимодействии двух отрывных потоков различного масштаба // ПМТФ. 2015. Т. 56. № 5. С. 156.
13. *Park H., Jeon W.-P., Choi H., Yoo J.Y.* Mixing Enhancement behind a Backward-facing Step Using Tabs // Phys. Fluids. 2007. V. 19. № 10. 105103.
14. *Дьяченко А.Ю., Жданов В.Л., Смульский Я.И., Терехов В.И.* Экспериментальное исследование теплообмена в отрывной области за обратным уступом при наличии табов // Теплофизика и аэромеханика. 2019. Т. 26. № 4. С. 549.
15. *Isaev S.A., Leontiev A.I., Chudnovsky Ya.P., Nikushchenko D., Popov I.A., Sudakov A.* Simulation of Vortex Heat Transfer Enhancement in the Turbulent Water Flow in the Narrow Plane-Parallel Channel with an Inclined Oval-Trench Dimple of Fixed Depth and Spot Area // Energies. 2019. V. 12. P. 1296.
16. *Terekhov V.I., Bogatko T.V.* Effect of Dynamic and Thermal Prehistory on Aerodynamic Characteristics and Heat Transfer behind a Sudden Expansion in a Round Tube // Heat Mass Transfer. 2017. V. 53. P. 775.

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР, 2021, том 59, № 1, с. 133–139

УДК 532.529:534.2

ВЛИЯНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ НА РАСПРОСТРАНЕНИЕ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН В МНОГОФРАКЦИОННЫХ ГАЗОВЗВЕСЯХ С ПОЛИДИСПЕРСНЫМИ ВКЛЮЧЕНИЯМИ

© 2021 г. Д. А. Губайдуллин[1], *, Р. Р. Зарипов[1], **

[1]*Институт механики и машиностроения – ОСП ФГБУН*
“Федеральный исследовательский центр КазНЦ РАН”, г. Казань, Россия
**E-mail: gubaidullin@imm.knc.ru*
***E-mail: rinat_zaripov.imm@mail.ru*

Поступила в редакцию 14.01.2020 г.
После доработки 01.04.2020 г.
Принята к публикации 18.06.2020 г.

Исследовано распространение акустических волн в многофракционных смесях газа с паром, каплями и твердыми частицами с учетом межфазного массообмена. Дисперсная фаза состоит из $M + 1$ фракций, различающихся размерами включений, функциями распределения включений по размерам и материалами. Представлена система интегродифференциальных уравнений движения многофракционной полидисперсной смеси. Получено дисперсионное соотношение, которое обобщает известные ранее соотношения. Построены зависимости относительной скорости звука и декремента затухания на определенной длине волны от безразмерной частоты возмущения с учетом межфазного массообмена. Проанализировано влияние межфазного тепломассообмена и трения фаз на декремент затухания.

DOI: 10.31857/S0040364420060113

ВВЕДЕНИЕ

Как известно, многофазные среды широко распространены в природе и технике, например, газокапельные смеси широко используются в энергетике. Неоднородность смеси может привести к некорректной оценке параметров среды. Возникает необходимость учитывать полидисперсность и многофракционность смеси, а также эффекты, связанные с теплообменом, массообменом и межфазным трением. Различные проблемы акустики парогазокапельных смесей рассмотрены в известных монографиях [1–3]. Некоторые проблемы в двухфазных потоках представлены в [4, 5]. Влияние фазовых превращений на распространение акустических волн ранее исследовано в работах [6–11]. Влияние полидисперсности состава парогазокапельной смеси на распространение малых возмущений рассмотрено в [12, 13]. В [14] в рамках монодисперсной модели изучено распространение акустических волн в многофракционных газовзвесях при наличии фазовых превращений. В работе [15] исследуется распространение акустических волн в газовзвесях с учетом полидисперсности и многофракциональности смеси, но без учета фазовых превращений.

В настоящей работе рассматривается наиболее общий случай распространения акустических волн в многофракционных полидисперсных газовзвесях с учетом межфазного тепломассообмена и трения фаз, когда каждая фракция капель и частиц разных материалов имеет свои функции распределения по размерам.

ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим движение парогазокапельной смеси с полидисперсными твердыми частицами в плоском и одномерном случаях. Будем считать, что дисперсная фаза состоит из $M + 1$ полидисперсных фракций. При этом одна фракция участвует в фазовых переходах, а M фракций не участвуют. Каждая из фракций имеет разные размеры включений и описывается своей функцией распределения включений по размерам. Объемное содержание несущей фазы α_1 и каждой из фракций α_2 определяется как

$$\alpha_{2d} = \frac{4}{3}\pi\int_{\Delta r_d} N_0^d(r_d) r_d^3 dr_d, \quad \alpha_{2j} = \frac{4}{3}\pi\int_{\Delta r_j} N_0^j(r_j) r_j^3 dr_j,$$

$$\alpha_1 + \alpha_{2d} + \sum_{j=1}^{M}\alpha_{2j} = 1, \quad \Delta r_d = \left[r_d^{\min}, r_d^{\max}\right],$$

$$\Delta r_j = \left[r_j^{\min}, r_j^{\max}\right], \quad j = \overline{1, M}.$$

Здесь и далее нижний индекс 1 относится к несущей фазе, $2j$ – к дисперсной фазе j-й фракции.

Для удобства индекс d относится к каплям, j ($j = \overline{1, M}$) – к твердым частицам, $N_0^d(r_d)$, $N_0^j(r_j)$ – функции распределения капель и твердых частиц j-й фракции по радиусам.

Основными характеристиками смеси являются следующие параметры:

$$\rho_i = \rho_i^0\alpha_i,\quad k_i = \rho_i/\rho_1,\quad m_d = \frac{\rho_{2d}}{\rho_1},$$
$$m_j = \frac{\rho_{2j}}{\rho_1},\quad j = \overline{1, M}.$$

Здесь ρ_i, ρ_i^0 – средняя и истинная плотности несущей фазы ($i = 1$), капель ($i = 2d$) и твердых частиц ($i = 2j$) соответственно; k_i – начальные концентрации паровой ($i = V$) и газовой ($i = G$) компонент несущей фазы; m_d, m_j – массовые содержания капель и твердых частиц j-й фракции.

Будем рассматривать малые возмущения параметров $\varphi = \varphi_0 + \varphi'$ (штрих вверху обозначает возмущение параметра, нижний индекс 0 – начальное невозмущенное состояние).

Линеаризованные уравнения сохранения массы для фаз записываются аналогично [2, 15] и с учетом $M + 1$ полидисперсных фракций принимают вид

$$\begin{gathered}
\frac{\partial\rho_1'}{\partial t} + \rho_{10}\frac{\partial v_1'}{\partial x} = -\int\limits_{\Delta r_d} N_0^d(r_d) j_d dr_d,\\
\frac{\partial\rho_V'}{\partial t} + \rho_{V0}\frac{\partial v_1'}{\partial x} = -\int\limits_{\Delta r_d} N_0^d(r_d) j_d dr_d,\\
\frac{\partial\rho_{2d}'}{\partial t} + \int\limits_{\Delta r_d}\frac{\partial v_{2d}'}{\partial x} N_0^d(r_d) g_0^d(r_d) dr_d = \int\limits_{\Delta r_d} N_0^d(r_d) j_d dr_d,\\
\frac{\partial\rho_{2j}'}{\partial t} + \int\limits_{\Delta r_j}\frac{\partial v_{2j}'}{\partial x} N_0^j(r_j) g_0^j(r_j) dr_j = 0,\quad j = \overline{1, M}.
\end{gathered}\tag{1}$$

Уравнение сохранения импульса с учетом $M + 1$ полидисперсных фракций твердых частиц записывается в следующем виде:

$$\begin{gathered}
\rho_{10}\frac{\partial v_1'}{\partial t} + \frac{\partial p_1'}{\partial x} + \int\limits_{\Delta r_d} f_d N_0^d(r_d) dr_d +\\
+ \sum_{j=1}^{M}\int\limits_{\Delta r_j} f_j N_0^j(r_j) dr_j = 0,
\end{gathered}\tag{2}$$

$$g_0^d(r_d)\frac{\partial v_{2d}'}{\partial t} = f_d,\quad g_0^j(r_j)\frac{\partial v_{2j}'}{\partial t} = f_j,\quad j = \overline{1, M}.$$

Уравнения внутренней энергии для несущей фазы, капель, частиц и их межфазной поверхности принимают вид [2, 15]

$$\begin{gathered}
\rho_{10} c_{p1}\frac{\partial T_1'}{\partial t} - \alpha_{10}\frac{\partial p}{\partial t} + \int\limits_{\Delta r_d} N_0^d(r_d) q_{1d} dr_d +\\
+ \sum_{j=1}^{M}\int\limits_{\Delta r_j} N_0^j(r_j) q_{1j} dr_j = 0,\\
g_0^d(r_d) c_{p2d}\frac{\partial T_{2d}'}{\partial t} = -q_{2d},\quad g_0^j(r_j) c_{p2j}\frac{\partial T_{2j}'}{\partial t} = -q_{2j},\\
j = \overline{1, M},\quad q_{1d} + q_{2d} = -j_d l_0,\\
q_{1j} + q_{2j} = 0,\quad j = \overline{1, M}.
\end{gathered}\tag{3}$$

Уравнения состояния пара и газовой смеси удобно записать в следующем виде [2]:

$$\begin{gathered}
p_V' = \frac{C_V^2}{\gamma_V\alpha_{10}}\rho_V' + p_{V0}\frac{T_1'}{T_{10}},\\
p_1' = \frac{C_1^2}{\gamma_1\alpha_{10}}(\rho_1' + \Delta\bar{R}(\rho_V' - k_V\rho_1')) + \frac{p_{10}}{T_{10}}T_1',\\
\Delta\bar{R} = \frac{R_V - R_G}{k_V R_V + k_G R_G}.
\end{gathered}\tag{4}$$

Анализ показывает, что при $\rho_2^0 \gg \rho_1^0$ основными силами, действующими на индивидуальную частицу или каплю дисперсной фазы, являются силы Стокса и Бассэ [1, 2]. Тогда силу, действующую на каплю и частицу, можно определить как сумму этих двух сил:

$$\begin{gathered}
f_d = g_0^d\frac{v_1' - v_{2d}'}{\tau_{vd}^*},\quad f_j = g_0^j\frac{v_1' - v_{2j}'}{\tau_{v2j}^*},\\
j = \overline{1, M},\quad \tau_{vk}^* = \tau_{vk}\left[1 - \frac{1-i}{\sqrt{2}}\sqrt{\omega\tau_{\mu 1k}}\right]^{-1},\\
\tau_{vk} = \frac{2}{9}\frac{\rho_{2k}^0 r_k^2}{\mu_1},\quad \tau_{\mu 1k} = \frac{\rho_1^0 r_k^2}{\mu_1},\quad k = d, 1, \ldots M.
\end{gathered}\tag{5}$$

Тепловые потоки q, а также интенсивность фазовых переходов j_d определены соотношениями [2, 12]

$$\begin{gathered}
q_{1d} = g_0^d\frac{c_{p1}}{m_d}\frac{T_1' - T_{\Sigma d}'}{\tau_{T1d}^*},\quad q_{2d} = g_0^d c_{p2d}\frac{T_{2d}' - T_{\Sigma d}'}{\tau_{T2d}^*},\\
q_{1j} = g_0^j\frac{c_{p1}}{m_j}\frac{T_1' - T_{\Sigma j}'}{\tau_{T1j}^*},\quad q_j = g_0^j c_{p2j}\frac{T_{2j}' - T_{\Sigma j}'}{\tau_{T2j}^*},\\
j = \overline{1, M},\quad j_d = g_0^d\frac{m_d^0}{p_{10}}\frac{p_V' - p_{V\Sigma d}'}{\tau_{k1d}^*} =\\
= g_0^d\frac{m_d^0}{p_{10}}\frac{p_{V\Sigma d}' - p_{VS}'}{\tau_{\beta d}},\quad p_{VS}' = T_{\Sigma d}' l_0\frac{\rho_{V0}^0}{T_{10}}.
\end{gathered}\tag{6}$$

Здесь

$$\tau^*_{T1k} = \frac{1}{3}\frac{\alpha_1}{\alpha_{2k}}\frac{\tau_{\lambda 1k}}{1+z_{1k}},$$

$$\tau^*_{T2k} = \frac{1}{3}\tau_{\lambda 2k}\frac{3z_{2k} - (3+z_{2k}^2)\mathrm{th}(z_{2k})}{z_{2k}^2\left(\mathrm{th}(z_{2k}) - z_{2k}\right)},$$

$$z_{1k} = \frac{1-i}{\sqrt{2}}\sqrt{\omega\tau_{\lambda 1k}},\quad z_{2k} = \frac{1-i}{\sqrt{2}}\sqrt{\omega\tau_{\lambda 2k}},$$

$$\tau_{\lambda 1k} = \frac{r_k^2\rho_1^0 c_{p1}}{\lambda_1},\quad \tau_{\lambda 2k} = \frac{r_k^2\rho_{2k}^0 c_{p2k}}{\lambda_{2k}},\quad m_k^0 = \frac{\rho_{10}^0}{\rho_{20k}^0},$$

$$k = d,1,\ldots M,\quad \tau_{k1d} = \frac{1}{3}\bar{R}_v\left(1-k_v\right)\frac{\tau_d}{1+y},$$

$$\tau_{\beta d} = \frac{1}{3}\frac{\sqrt{2\pi}}{\gamma_V}\frac{\gamma_1 C_V r_d}{\beta C_1^2},\quad \tau_d = \frac{r_d^2}{D_1},\quad y = \frac{1-i}{\sqrt{2}}\sqrt{\omega\tau_d}.$$

В приведенных уравнениях приняты следующие обозначения: C – скорость звука, D_1 – коэффициент диффузии, R – газовая постоянная, c_p – теплоемкость, v – скорость, p – давление, g_0 – масса частицы или капли, l_0 – удельная теплота парообразования, r – радиус включений, Δr – диапазон изменения радиуса включений, T – температура, t – время, x – координата, α – объемное содержание, β – коэффициент аккомодации, γ – показатель адиабаты, λ – коэффициент теплопроводности, μ – коэффициент динамической вязкости, ω – частота возмущений, τ_v – время релаксации скоростей фаз при квазистационарном обтекании частиц газом, $\tau_{\mu 1}$ – характерное время установления квазистационарного распределения скорости в газообразной фазе, $\tau_{\beta d}$ – характерное время выравнивания парциальных давлений пара на межфазной границе, τ^*_{k1d} – комплексное время релаксации парциального давления пара, τ_d – характерное время установления квазистационарного распределения концентрации пара, τ_{Tj} – время релаксации температуры в j-й фазе, $\tau_{\lambda 1k}$ – характерное время проникания возмущения температуры от поверхности частицы в j-фазу.

ДИСПЕРСИОННОЕ СООТНОШЕНИЕ

Решение системы уравнений (1)–(6) будем искать в виде прогрессивных волн для возмущений $\varphi' = \rho', p', T'$ [1]:

$$\varphi' = A_\varphi \exp[i(K_* x - \omega t)],\quad K_* = K + iK_{**},$$
$$C_p = \omega/K,\quad \sigma = 2\pi K_{**}/K.$$

Здесь K_* – комплексное волновое число, K_{**} – линейный коэффициент затухания, C_p – фазовая скорость, σ – декремент затухания на длине волны, A_φ – амплитуда.

Введем $v'_k = \dfrac{\partial\varphi'_k}{\partial x}, \varphi'_k = A_{\varphi k}e^{i(K_* x - \omega t)}$ [12], тогда уравнения (1)–(6) примут вид

$$-i\omega A_{\rho 1} - \rho_{10}K_*^2 A_{\varphi 1} + \frac{m_d^0\rho_{20}^d}{p_{10}}\left\langle\frac{A_{pV} - A_{pV\Sigma d}}{\tau^*_{k1d}}\right\rangle_d = 0,$$
$$-i\omega A_{\rho V} - \rho_{V0}K_*^2 A_{\varphi 1} + \frac{m_d^0\rho_{20}^d}{p_{10}}\left\langle\frac{A_{pV} - A_{pV\Sigma d}}{\tau^*_{k1d}}\right\rangle_d = 0, \tag{7}$$

$$-i\omega A_{\rho 2d} - \rho_{20}^j K_*^2\left\langle A_{\varphi 2d}\right\rangle_d = \frac{m_d^0\rho_{20}^d}{p_{10}}\left\langle\frac{A_{pV\Sigma d} - A_{pVS}}{\tau_{\beta d}}\right\rangle_d,$$
$$-i\omega A_{\rho 2j} - \rho_{20}^j K_*^2\left\langle A_{\varphi 2j}\right\rangle_j = 0,\quad j = \overline{1,M},$$

$$\omega K_*\rho_{10}A_{\varphi 1} + iK_* A_{p1} + iK_*\rho_{20}^d\left\langle\frac{A_{\varphi 1} - A_{\varphi 2d}}{\tau^*_{vd}}\right\rangle_d + \tag{8}$$
$$+ iK_*\sum_{j=1}^{M}\rho_{20}^j\left\langle\frac{A_{\varphi 1} - A_{\varphi 2j}}{\tau^*_{vj}}\right\rangle_j = 0,$$

$$-i\omega A_{\varphi 2d} - \frac{A_{\varphi 1} - A_{\varphi 2d}}{\tau^*_{vd}} = 0,$$
$$-i\omega A_{\varphi 2j} - \frac{A_{\varphi 1} - A_{\varphi 2j}}{\tau^*_{vj}} = 0,\quad j = \overline{1,M}, \tag{9}$$

$$-i\omega A_{T1} + \frac{i\omega}{\rho_{10}^0 c_{p1}}A_{p1} + \left\langle\frac{A_{T1} - A_{T\Sigma d}}{\tau^*_{T1d}}\right\rangle_a +$$
$$+ \sum_{j=1}^{M}\left\langle\frac{A_{T1} - A_{T\Sigma j}}{\tau^*_{T1j}}\right\rangle_j = 0, \tag{10}$$

$$-i\omega A_{T2d} + \frac{A_{T2d} - A_{T\Sigma d}}{\tau^*_{T2d}} = 0,$$
$$-i\omega A_{T2j} + \frac{A_{T2j} - A_{T\Sigma j}}{\tau^*_{T2j}} = 0,\quad j = \overline{1,M}, \tag{11}$$

$$\frac{c_{p1}}{m_d}\frac{A_{T1} - A_{T\Sigma d}}{\tau^*_{T1d}} + c_{p2d}\frac{A_{T2d} - A_{T\Sigma d}}{\tau^*_{T2d}} +$$
$$+ \frac{m_d^0 l_0}{p_{10}}\frac{A_{pV\Sigma d} - A_{pVS}}{\tau_{\beta d}} = 0, \tag{12}$$

$$c_{p1}\frac{A_{T1} - A_{T\Sigma j}}{\tau^*_{T1j}} + m_j c_{p2j}\frac{A_{T2j} - A_{T\Sigma j}}{\tau^*_{T2j}} = 0,$$
$$j = \overline{1,M}, \tag{13}$$

$$A_{pV} - \frac{C_V^2}{\gamma_V\alpha_{10}}A_{\rho V} - \frac{p_{V0}}{T_{10}}A_{T1} = 0, \tag{14}$$

$$A_{p1} - \frac{C_1^2}{\gamma_1\alpha_{10}}\left[\left(1 - \Delta\bar{R}k_v\right)A_{\rho1} + \Delta\bar{R}A_{\rho V}\right] - \frac{p_{10}}{T_{10}}A_{T1} = 0, \quad (15)$$

$$\frac{A_{pV\Sigma d} - A_{pVS}}{\tau_{\beta d}} = \frac{A_{pV} - A_{pV\Sigma d}}{\tau_{k1d}^*},$$
$$A_{pVS} = \frac{l_0\rho_{V0}^0}{T_{10}}A_{T\Sigma d}, \quad (16)$$

Здесь $\langle h\rangle_j = \frac{1}{\rho_{20}^j}\int_{\Delta r_j} N_0^j(r_j)g_0^j(r_j)h_j dr_j$ ($j = d$, 1, ..., M) – оператор осреднения [2].

Выразив A_{T2j} из второго уравнения (11) и подставив полученное выражение в (13), получим выражение для $A_{T\Sigma j}$:

$$A_{T\Sigma j} = \frac{A_{T1}}{1 - e_{1j}t_{ej}}, \quad j = \overline{1, M}, \quad (17)$$

где $e_{1j} = \frac{c_{p2j}}{c_{p1}m_j^0}\frac{1}{1 - i\omega\tau_{T2j}^*}$, $t_{ej} = m_j m_j^0 i\omega\tau_{T1j}^*$ $j = \overline{1, M}$.

Далее из первого уравнения (11) находим A_{T2d}, а из первого уравнения (16) – $A_{pV\Sigma d}$. Тогда уравнение (12) с учетом полученных выражений для A_{T2d} и $A_{pV\Sigma d}$ принимает вид

$$\frac{c_{p1}}{m_d}\frac{A_{T1} - A_{T\Sigma d}}{\tau_{T1d}^*} + i\omega c_{p2d}\frac{1}{1 - i\omega\tau_{T2d}^*}A_{T\Sigma d} + {}$$
$$+ \frac{m_d^0 l_0}{p_{10}}\frac{A_{pV} - A_{pVS}}{\tau_{\beta d} + \tau_{k1d}^*} = 0.$$

Дальше в данное уравнение подставляется выражение для A_{pVS}, и из второго уравнения (16) получается

$$\frac{A_{T1} - A_{T\Sigma d}}{t_{ed}} + e_{1d}A_{T\Sigma d} + {}$$
$$+ \frac{l_0}{p_{10}c_{p1}}\left(A_{pV} - \frac{l_0\rho_{V0}^0}{T_{10}}A_{T\Sigma d}\right)e = 0, \quad (18)$$

где $e_{1d} = \frac{c_{p2d}}{m_d^0 c_{p1}}\frac{1}{1 - i\omega\tau_{T2d}^*}$, $e = \frac{1}{i\omega(\tau_{\beta d} + \tau_{k1d}^*)}$, $t_{ed} = m_d m_d^0\tau_{T1d}^* i\omega$. Вводя обозначения $Z = \left[1 - t_{ed}\left(e_{1d} - eL\right)\right]^{-1}$ и $L = \frac{\bar{l}_0^2\rho_{V0}^0}{c_{p1}p_{10}T_{10}}$, из уравнения (18) получаем выражение для $A_{T\Sigma d}$:

$$A_{T\Sigma d} = Z\left(A_{T1} + \frac{l_0}{p_{10}c_{p1}}et_{ed}A_{pV}\right). \quad (19)$$

Из уравнений (8) и (9) находится значение A_{p1}:

$$A_{p1} = i\omega\rho_{10}A_{\varphi1}V(\omega). \quad (20)$$

Здесь

$$V(\omega) = 1 + m_d\left\langle\frac{1}{1 - i\omega\tau_{vd}^*}\right\rangle_d + \sum_{j=1}^{M} m_j\left\langle\frac{1}{1 - i\omega\tau_{vj}^*}\right\rangle_j,$$
$$m_d = \frac{\rho_{20}^d}{\rho_{10}}, \quad m_j = \frac{\rho_{20}^j}{\rho_{10}}, \quad j = \overline{1, M}.$$

Из уравнений (14) и (15) получим

$$\frac{C_1^2}{\gamma_1\alpha_{10}}\bar{R}_v A_{\rho V} = A_{p1} - \frac{p_{10}}{T_{10}}A_{T1} + {}$$
$$+ \frac{C_1^2}{\gamma_1\alpha_{10}}\frac{K_*^2}{i\omega}\rho_{10}\left(1 - k_v\bar{R}_v\right)A_{\varphi1}.$$

В данное уравнение подставим выражение для A_{p1} из (20) и получим следующее уравнение:

$$\frac{C_1^2}{\gamma_1\alpha_{10}}\bar{R}_v A_{\rho V} = i\omega\rho_{10}A_{\varphi1}V(\omega) - \frac{p_{10}}{T_{10}}A_{T1} + {}$$
$$+ \frac{C_1^2}{\gamma_1\alpha_{10}}\frac{K_*^2}{i\omega}\rho_{10}\left(1 - k_v\bar{R}_v\right)A_{\varphi1}. \quad (21)$$

При учете (17) и (20) уравнение (10) примет вид

$$-i\omega A_{T1} - \frac{\alpha_{10}}{c_{p1}}\omega^2 A_{\varphi1}V(\omega) + \left\langle\frac{A_{T1} - A_{T\Sigma d}}{\tau_{T1d}^*}\right\rangle_d - {}$$
$$- i\omega\sum_{j=1}^{M}\left\langle\frac{m_{2j}e_{1j}}{1 - e_{1j}t_{ej}}\right\rangle_j A_{T1} = 0, \quad (22)$$

где $m_{2j} = m_j m_j^0$, $j = \overline{1, M}$.

Уравнение (7) с учетом (16) и (14) примет вид

$$-i\omega A_{\rho V} - \rho_{V0}K_*^2 A_{\varphi1} + \frac{m_d\rho_{20}^d}{p_{10}}\times$$
$$\times\left\langle\left(\frac{C_1^2\bar{R}_v}{\gamma_1\alpha_{10}}A_{\rho V} + \frac{p_{V0}}{T_{10}}A_{T1} - \frac{l_0\rho_{V0}^0}{T_{10}}A_{T\Sigma d}\right)i\omega e\right\rangle_d = 0. \quad (23)$$

Уравнение (19) при учете (14) запишем как

$$A_{T\Sigma d} = Z\left[A_{T1} + \frac{l_0}{p_{10}c_{p1}}et_{ed}\left(\frac{C_1^2\bar{R}_v}{\gamma_1\alpha_{10}}A_{\rho V} + \frac{p_{V0}}{T_{10}}A_{T1}\right)\right]. \quad (24)$$

Таким образом, получена система уравнений (21)–(24) с неизвестными $A_{T1}, A_{\rho V}, A_{\varphi1}$. Исключая неизвестные из данной системы, найдем дисперсионное соотношение

$$\left(\frac{C_1K_*}{\omega}\right)^2 = V(\omega)D(\omega), \quad (25)$$

где

$$V(\omega) = 1 + m_d \left\langle \frac{1}{1 - i\omega\tau^*_{vd}} \right\rangle_d + \sum_{j=1}^{M} m_j \left\langle \frac{1}{1 - i\omega\tau^*_{vj}} \right\rangle_j ,$$

$$D(\omega) = 1 + (\gamma_1 - 1)\frac{m_{2d}\left(H_2 - k_v\overline{R}_v\gamma_1\left(\overline{R}_v\overline{c}_1H_3 - 2\overline{l}_0H_1\right) - M_{1d}\Lambda\right) + \left(1 - M_{1d}H_3\right)t_b}{1 + m_{2d}\left(H_2 - BH_3 - M_{2d}\Lambda\right) + \left(1 - M_{2d}H_3\right)t_b},$$

$$\Lambda = LH_1^2 + H_2H_3, \quad M_{1d} = \overline{c}_1 m_{2d}\overline{R}_v\left(\gamma_1 - 1 + \overline{R}_v k_v\right),$$

$$B = \overline{R}_v\left(1 - \overline{R}_v k_v\right),$$

$$H_i = \langle h_i \rangle_d, \quad i = 1\text{–}3, \quad h_1 = eZ, \quad h_2 = (e_{1d} - Le)Z,$$

$$h_3 = e\left(1 - e_{1d}t_{ed}\right)Z,$$

$$Z = \left[1 - t_{ed}\left(e_{1d} - eL\right)\right]^{-1}, \quad e_{1d} = \frac{c_{p2d}}{m_d^0 c_{p1}}\frac{1}{1 - i\omega\tau^*_{T2d}},$$

$$e = \frac{1}{i\omega(\tau_{\beta d} + \tau^*_{k1d})},$$

$$t_{ed} = m_d m_d^0 \tau^*_{T1d} i\omega, \quad t_b = \sum_{j=1}^{M} m_{2j}\left\langle \frac{e_{1j}}{1 - e_{1j}t_{ej}} \right\rangle_j ,$$

$$L = \gamma_1(\gamma_1 - 1)k_v\overline{l}_0^2, \quad \overline{l}_0 = \frac{l_0}{C_1^2}.$$

При отсутствии межфазного массообмена ($k_v = 0$) соотношение (25) согласуется с соответствующим соотношением [15]. В случае, когда рассматривается двухфракционная парогазокапельная смесь ($j = 1$), соотношение (25) согласуется с [12].

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

На рис. 1 представлено сравнение зависимостей относительной скорости звука C_p/C_1 и декремента затухания на длине волны σ от безразмерной частоты возмущений $\Omega_{3,1}$ для смеси газа с паром, каплями воды, частицами песка и алюминия с учетом и без учета межфазного массообмена. Безразмерная частота возмущений, согласно [2], имеет вид $\Omega_{3,1} = \omega\tau_{vd}^{(3,1)}$, где $\tau_{vd}^{(3,1)}$ – время релаксации скорости для среднего радиуса капель воды $r_d^{(3,1)} = \sqrt{\left\langle r_d^3 \right\rangle / \left\langle r_d^1 \right\rangle}$. Зависимости рассчитаны по (25) при следующих значениях параметров смеси: $p_0 = 0.1$ МПа, $T_0 = 327$ K, $k_v = 0.1$. Кривые построены с учетом значений массовых содержаний капель воды $m_d = 0.1$, частиц песка $m_b = 0.1$ и алюминия $m_c = 0.1$. Радиус включений изменялся в диапазоне: для капель воды $r_d \in \left[10^{-4}, 10^{-3}\right]$ м, частиц песка $r_b \in \left[5\times10^{-5}, 10^{-4}\right]$ м и алюминия $r_c \in \left[10^{-7}, 10^{-6}\right]$ м. Функции распределения включений по размерам имеют вид $N_0^j(r_j) = r_j^{-3}$, $j = d, b, c$.

Учет межфазного массообмена приводит к уменьшению относительной скорости только при низких частотах $\Omega_{3,1} < 10^{-1}$, а при $\Omega_{3,1} > 10^{-1}$ не оказывает существенного влияния (рис. 1а). Также учет межфазного массообмена приводит к увеличению декремента затухания на длине волны при $\Omega_{5,3} < 10^1$ и не оказывает влияния при частотах $\Omega_{5,3} > 10^1$ (рис. 1б). Как и следовало ожидать, кривая, описывающая распространение акусти-

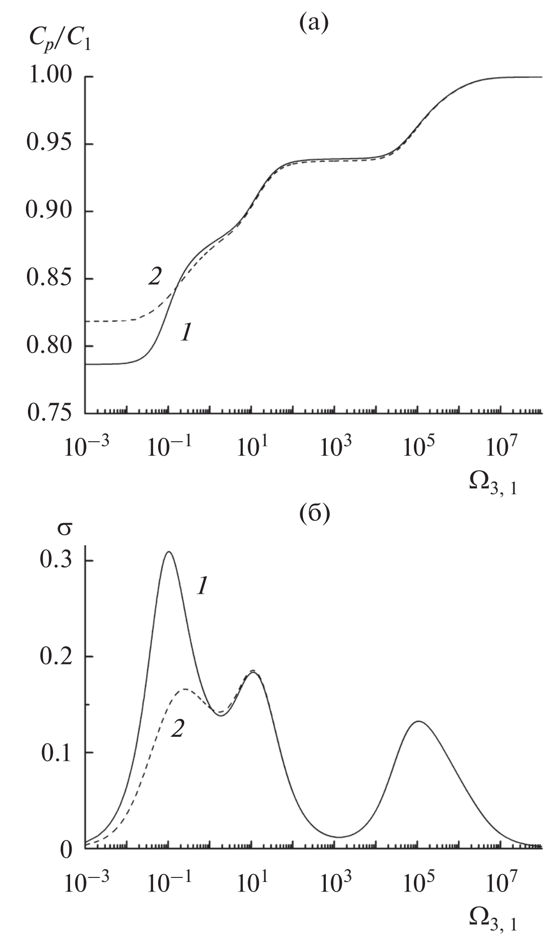


Рис. 1. Зависимости относительной скорости звука (а) и декремента затухания на длине волны σ (б) от безразмерной частоты возмущения: *1* – с учетом, *2* – без учета влияния межфазного массообмена.

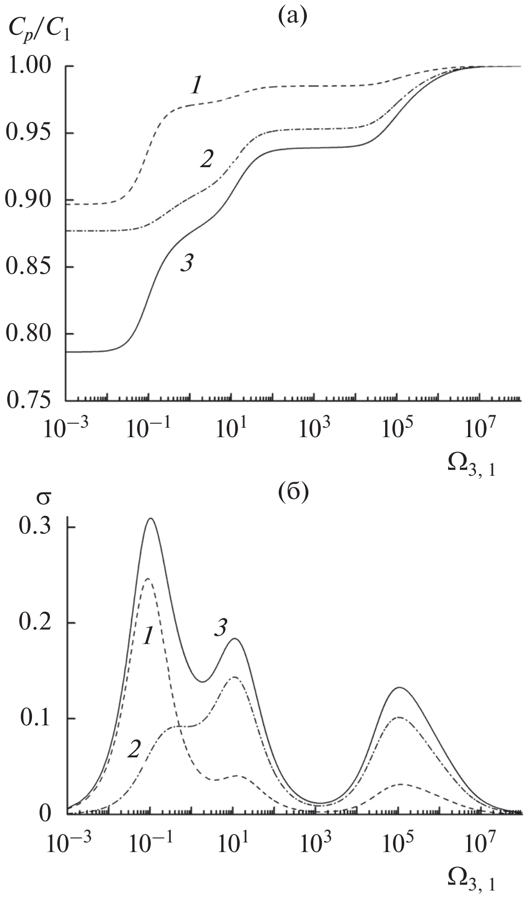


Рис. 2. Зависимости относительной скорости звука (а) и декремента затухания на длине волны σ (б) от безразмерной частоты возмущения с учетом: *1* – индивидуального вклада тепломассообмена между каплями воды и несущей средой и теплообмена между твердыми частицами и несущей средой, *2* – индивидуального вклада межфазного трения, *3* – совместного вклада.

ческой волны, терпит три характерных перегиба. У кривой, описывающей затухание акустической волны, появляются три ярко выраженных максимума. Подобные эффекты связаны с различными теплофизическими свойствами и различными радиусами включений каждой фракции [15]. Выбор данных массовых содержаний и размеров включений каждой фракции обусловлен тем, что при заданных параметрах смеси ярко проявляются подобные эффекты. Если диапазоны изменения параметров включений каждой фракций одного порядка, то подобные эффекты ярко не проявляются. Отметим, что увеличение массовых содержаний каждой фракции приведет к более сильному затуханию волн и снижению относительной скорости звука.

На рис. 2 приведены зависимости относительной скорости C_p/C_1 звука и декремента затухания на длине волны σ от безразмерной частоты возмущений $\Omega_{3,1}$ для смеси с такими же параметрами, как на рис. 1. Влияние межфазного тепломассообмена на распространение акустической волны превышает влияние межфазного трения во всем диапазоне рассматриваемых частот (рис. 2а). Основной вклад межфазного тепломассообмена в затухание волны (рис. 2б) проявляется при частоте $\Omega_{3,1} \approx m$, а при частотах $\Omega_{3,1} < 10$ и $\Omega_{3,1} < 10^5$ затухание волны в основном связано с эффектами межфазного трения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изучено распространение акустических волн в многофракционной полидисперсной парогазокапельной смеси газа с твердыми частицами. Представлена замкнутая система интегродифференциальных уравнений движения смеси газа с паром, каплями и твердыми частицами. Выведено дисперсионное соотношение, и рассчитаны дисперсионные кривые. Проанализировано влияние межфазного массообмена на распространение и затухание акустических волн. Установлено, что при моделировании с учетом межфазного массообмена затухание волн больше, а скорость распространения звука в рассматриваемой смеси меньше при низких частотах. Показано влияние учета многофракционности смеси на распространение и затухание акустических волн в воздушном тумане с примесями частиц разных сортов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-11-20070).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Нигматуллин Р.И.* Динамика многофазных сред. М.: Наука, 1987. 464 с.
2. *Губайдуллин Д.А.* Динамика двухфазных парогазокапельных сред. Казань: Изд-во Казанск. матем. об-ва, 1998. 153 с.
3. *Temkin S.* Suspension Acoustics: An Introduction to the Physics of Suspension. N.Y.: Cambridge University Press, 2005. 398 p.
4. *Вараксин А.Ю.* Обтекание тел дисперсными газовыми потоками // ТВТ. 2018. Т. 56. № 2. С. 282.
5. *Вараксин А.Ю.* Столкновения частиц и капель в турбулентных двухфазных потоках // ТВТ. 2019. Т. 57. № 4. С. 588.
6. *Marble F.E.* Dynamics of Dusty Gases // Annu. Rev. Fluid Mech. 1970. V. 2. P. 397.
7. *Cole J.E., Dobbims R.A.* Measurements of Attenuation and Dispersion of Sound by a Warm Air Fog // J. Atmos. Sci. 1971. V. 28. № 2. P. 202.
8. *Davidson G.A.* Sound Propagation in Fog // J. Atmos. Sci. 1975. V. 38. № 2. P. 1106.
9. *Губайдуллин Д.А., Ивандаев А.И.* Влияние фазовых превращений на распространение звука в туманах.

Сопоставление теории с экспериментом // ПМТФ. 1990. № 6. С. 27.

10. *Шагапов В.Ш.* О распространении малых возмущений в парогазокапельной среде // ТВТ. 1987. Т. 25. № 6. С. 1148.
11. *Ивандаев А.И., Нигматуллин Р.И.* Особенности распространения слабых возмущений в двухфазных средах с фазовыми переходами // ЖПМиТФ. 1970. № 5. С. 73.
12. *Губайдуллин Д.А., Федоров Ю.В.* Сферические и цилиндрические волны в парогазовых смесях с полидисперсными частицами и каплями // ТВТ. 2012. Т. 50. № 5. С. 659.
13. *Гумеров Н.А. Ивандаев А.И.* Распространение звука в полидисперсных газовзвесях // ПМТФ. 1988. № 5. С. 115.
14. *Губайдуллин Д.А., Терегулова Е.А., Губайдуллина Д.Д.* Распространение акустических волн в многофракционных газовзвесях // ТВТ. 2018. Т. 56. № 5. С. 789.
15. *Губайдуллин Д.А., Зарипов Р.Р.* Акустические волны в многофракционных газовзвесях с полидисперсными включениями // ТВТ. 2019. Т. 57. № 3. С. 475.

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР, 2021, том 59, № 1, с. 140–147

УДК 536.2+510.5

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ТЕПЛООТДАЧИ И ТЕМПЕРАТУРЫ ГАЗОВОГО ПОТОКА ПО ИЗМЕРЕНИЯМ ТЕМПЕРАТУРЫ МАТЕРИАЛА

В. Г. Зверев[1, *], А. А. Светашков[2], А. В. Теплоухов[3]

[1]Томский государственный университет, г. Томск, Россия

[2]Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

[3]АО "Корпорация "Московский институт теплотехники", Москва, Россия

*E-mail: zverev@niipmm.tsu.ru

Поступила в редакцию 08.07.2019 г.
После доработки 07.02.2020 г.
Принята к публикации 18.06.2020 г.

На основе решения граничной обратной задачи теплопроводности предложена методика расчета коэффициента теплоотдачи и температуры стационарного газового потока по измерению температуры материала теплоизолированной пластины. В методике не используется сглаживание и численное дифференцирование экспериментальных данных. Дан анализ коэффициентов чувствительности решения к изменению параметров конвективного теплообмена. Определен временно́й диапазон, внутри которого регистрация экспериментальных данных оказывается наиболее информативной для определения искомых параметров с наименьшим влиянием погрешности измерений. Применение методики не требует выбора режима нагрева материала и позволяет повысить точность определения параметров конвективного теплообмена.

DOI: 10.31857/S004036442006023X

ВВЕДЕНИЕ

Решение задач теплового проектирования конструкций при воздействии высокоэнтальпийных газовых потоков на теплозащитные материалы требует знания основных параметров конвективного теплообмена – коэффициента теплоотдачи α_e и температуры потока T_e [1]. Коэффициент теплоотдачи характеризует интенсивность теплообмена между поверхностью тела и окружающей средой и представляет собой коэффициент пропорциональности в законе Ньютона–Рихмана для конвективного теплового потока [2]. Он играет важную роль в инженерных приложениях и позволяет описание сопряженных процессов переноса тепла в обтекаемом газе и твердом теле разделить на решение двух самостоятельных отдельных задач [3]. На основе знания коэффициента теплоотдачи в граничном условии третьего рода для уравнения теплопроводности в твердом теле осуществляется расчет теплового состояния конструкции [2].

В отличие от температуры, являющейся термодинамической величиной, коэффициент теплоотдачи напрямую нельзя измерить инструментальными методами. Он сложным образом зависит от большого количества параметров, поэтому отсутствуют строгие аналитические зависимости для его расчета на основе уравнений конвективного теплопереноса. На практике коэффициент теплоотдачи обычно определяется из критериальных уравнений, полученных преобразованием определяющих дифференциальных уравнений методами теории подобия. С их помощью обобщаются многочисленные экспериментальные данные для ряда канонических ситуаций по обтекаемому твердому телу и теплоносителю. Такого рода зависимости приводятся в справочной литературе по теплообмену [3].

Однако использование известных критериальных зависимостей для чисел Нуссельта, на основе которых рассчитывается коэффициент теплоотдачи, зачастую приводит к значительным погрешностям, так как реальные ситуации тепловых воздействий на материалы и конструкции, как правило, далеки от канонических. Поэтому с целью более достоверного определения тепловых потоков проводятся экспериментальные исследования в лабораторных, стендовых или реальных условиях эксплуатации, основанные на измерениях температурных полей в материале и их последующей обработке для определения локальных или средних коэффициентов теплоотдачи.

Следует иметь в виду, что любые экспериментальные измерения содержат погрешность, поэтому при их обработке нежелательно использование операции численного дифференцирования из-за ее неустойчивости к возмущению исходных данных. Предварительное сглаживание также

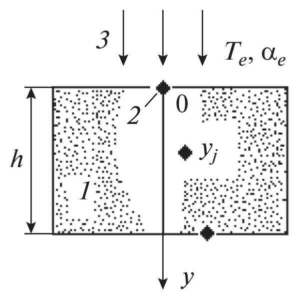


Рис. 1. Схема нагрева образца потоком газа: *1* – образец, *2* – датчики температуры на глубине y_j, *3* – стационарный поток газа с температурой T_e и коэффициентом теплоотдачи α_e, h – толщина пластины.

приводит к их искажению и вносит дополнительную погрешность в решение.

В этой связи актуальным является вопрос определения параметров конвективного теплообмена по температурным измерениям на основе решения граничных обратных задач теплопроводности (ОЗТ) [4–6]. Необходимость применения ОЗТ обусловлена широким кругом приложений в различных областях науки и техники, и в ряде случаев они являются единственным средством получения информации. Обзор исследований по проблемам и методам решения ОЗТ, а также их различным приложениям можно найти в работах [4–13].

Численная методика решения нелинейной граничной обратной задачи теплопроводности в экстремальной постановке развита в работе [14]. В ней в рамках общего одномерного подхода к описанию задачи численным образом рассмотрено определение нестационарного коэффициента теплоотдачи при смачивании нагретых поверхностей.

В [15] для диагностики стационарных газовых потоков предложена методика определения параметров конвективного теплообмена на основе решения граничной ОЗТ в приближении полубесконечного тела. Это накладывает определенные ограничения на время теплового воздействия и необходимую толщину образца, так как тепловая волна не должна достигать его тыльной поверхности. Учет толщины образца в тепловом процессе позволяет снять ограничения и расширить возможности эксперимента по диагностике воздействия высокоэнтальпийного газового потока на теплозащитные материалы.

Цель данной работы – дальнейшее развитие методики расчета параметров конвективного теплообмена [15] для повышения точности их определения по измерениям температуры материала теплоизолированной пластины на основе решения граничной ОЗТ.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим конвективный нагрев термически инертного образца в виде неограниченной пластины толщиной h стационарным потоком газа с температурой T_e и коэффициентом теплоотдачи α_e (рис. 1). Тыльная сторона пластины является теплоизолированной, теплофизические свойства материала постоянны. Математическая постановка задачи нагрева образца для рассматриваемого случая имеет вид [2, 16]

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a\frac{\partial^2 T}{\partial y^2},\quad a = \frac{\lambda}{\rho c},\quad t > 0,\quad 0 < y < h, \tag{1}$$

$$t = 0:\ \ T(y, 0) = T_0, \tag{2}$$

$$y = 0:\ \ -\lambda\frac{\partial T}{\partial y} = \alpha_e(T_e - T), \tag{3}$$

$$y = h:\ \ -\lambda\frac{\partial T}{\partial y} = 0. \tag{4}$$

Уравнение (1) описывает тепловое состояние инертного материала с начальным условием (2), краевым условием на наружной (3) и тыльной (4) поверхностях пластины. Здесь T – температура, t – время, y – координата, направленная в глубь образца, ρ – плотность, c – теплоемкость, λ – коэффициент теплопроводности материала; индексы: e – набегающий поток, 0 – начальные условия.

Определение температурной зависимости $T(y, t)$ на основе решения уравнения (1) при известных параметрах конвективного теплообмена T_e, α_e представляет собой прямую задачу теплопроводности.

Пусть в результате проведения теплофизического эксперимента получены значения температуры $Y(y_j, t_{i,j})$ в различные моменты времени $t_{i,j}$, $1 \le i \le N_j$, $1 \le j \le M$, где N_j – число точек измерений по времени для j датчика с координатой y_j, M – число датчиков. Восстановление параметров $\{\alpha_e, T_e\}$ по известным экспериментальным значениям температуры $Y(y_j, t_{i,j})$ составляет суть граничной обратной задачи теплопроводности [4–6].

Краевая задача (1)–(4) имеет аналитическое решение [2, 16], которое записывается в виде

$$\theta(\eta, \mathrm{Fo}, \mathrm{Bi}) = \frac{T(y,t) - T_0}{T_e - T_0} = \\ = 1 - \sum_{n=1}^{\infty}(-1)^{n+1}A_n\cos[\mu_n(1-\eta)]\exp(-\mu_n^2\mathrm{Fo}), \tag{5}$$

$$\mathrm{ctg}(\mu_n) = \frac{1}{\mathrm{Bi}}\mu_n,$$

$$\mathrm{Fo} = \frac{at}{h^2},\quad \mathrm{Bi} = \frac{\alpha_e h}{\lambda},\quad \eta = \frac{y}{h}, \tag{6}$$

$$A_n = \frac{2\mathrm{Bi}\sqrt{\mu_n^2 + \mathrm{Bi}^2}}{\mu_n(\mu_n^2 + \mathrm{Bi}^2 + \mathrm{Bi})}.$$

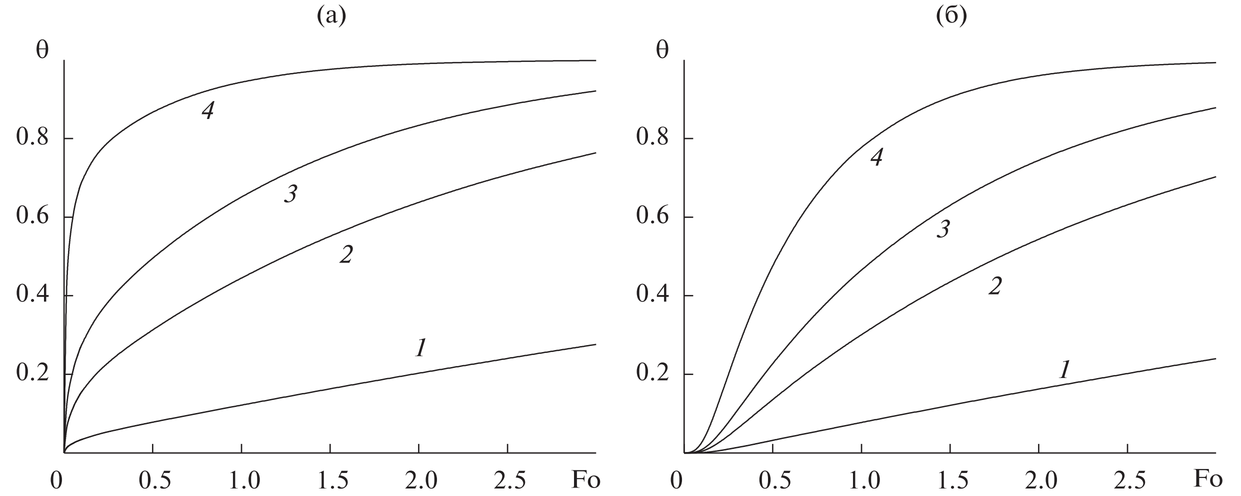


Рис. 2. Безразмерная температура наружной θ(0, Fo, Bi) (а) и тыльной θ(1, Fo, Bi) (б) поверхностей пластины в зависимости от времени Fo при различных значениях параметра Bi: *1* – Bi = 0.1, *2* – 0.5, *3* – 1, *4* – 5.

Здесь θ, η – безразмерные температура и координата; Fo – число Фурье (безразмерное время); Bi – критерий Био; A_n – амплитудный множитель; μ_n – корни характеристического уравнения (6). Для выполнения практических инженерных расчетов номограммы зависимости температуры $\theta(\eta, \mathrm{Fo}, \mathrm{Bi})$ для наружной ($\eta = 0$) и тыльной поверхностей ($\eta = 1$) пластины достаточно подробно представлены в литературе [2, 17]. Графики зависимости $\theta(0, \mathrm{Fo}, \mathrm{Bi})$ и $\theta(1, \mathrm{Fo}, \mathrm{Bi})$ для указанных поверхностей пластины при различных значениях Bi в диапазоне $0.1 < \mathrm{Bi} < 5$ показаны на рис. 2. Видно, что для тыльной поверхности имеет место сдвиг температурных кривых по числу Fo, обусловленный требуемым временем прохождения температурной волны по толщине пластины.

Корни μ_n характеристического уравнения (6) являются положительными и строго возрастающими, поэтому с ростом времени при $\mathrm{Fo} > 0.55$ [2] все члены ряда (5) становятся малыми по сравнению с первым. В этом случае решение (5) упрощается и принимает вид

$$\theta(\eta, \mathrm{Fo}, \mathrm{Bi}) = 1 - A_1 \cos[\mu_1(1-\eta)]\exp(-\mu_1^2 \mathrm{Fo}).$$

Данная стадия нагрева соответствует наступлению регулярного теплового режима, при котором зависимость между $(T_e - T)$ и временем t в любой точке пластины описывается простой экспонентой, а зависимость $\ln(T_e - T)$ от времени t имеет вид прямой. Такой характер поведения локального решения послужил основой для разработки приближенных методов расчета коэффициента теплоотдачи α_e [18] и успешно применяется на практике в настоящее время.

Однако следует заметить, что с увеличением числа Fo возрастает и влияние тепловых потерь на результаты измерений, которые трудно избежать в теплофизическом эксперименте. Поэтому при его постановке предпочтительны малые времена измерений, где для правильного расчета температуры требуется применение общего вида решения (5).

Несмотря на довольно сложную структуру (5) и необходимость решения трансцендентного уравнения (6), выражение (5) является точным, а не приближенным. Причем это преимущество имеет место и по отношению к численным методам решения прямой задачи (1)–(4) ввиду наличия в них ошибок аппроксимации. Следовательно, прямое использование (5) при решении ОЗТ позволяет повысить точность обработки результатов теплофизического эксперимента без выделения стадии нагрева (начальной, переходной, регулярной) и необходимого диапазона чисел Фурье (Fo).

КОЭФФИЦИЕНТЫ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ И ИХ АНАЛИЗ

Для планирования эксперимента необходимо знать оптимальное время, при котором экспериментальные данные содержат максимум информации об искомых параметрах, а влияние погрешности измерений на значения минимально. Математически это соответствует координате максимума производной от решения по искомому параметру.

Рассмотрим безразмерные коэффициенты чувствительности Z_{Te}, Z_{Bi} решения (5) к изменению параметров T_e и Bi (коэффициента теплоотдачи α_e)

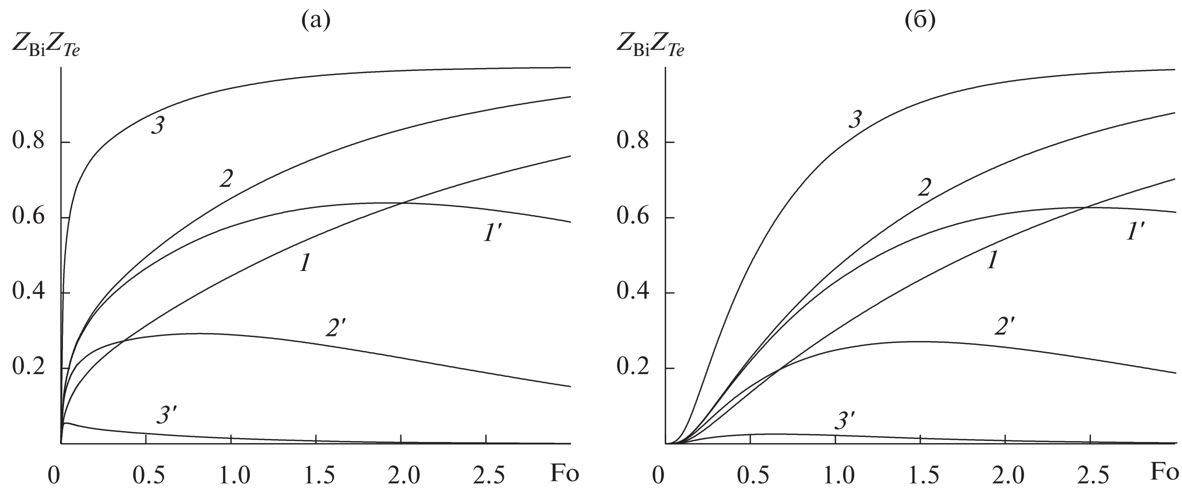


Рис. 3. Коэффициенты чувствительности Z_{Te} и Z_{Bi} в зависимости от времени Fo для наружной (а) и тыльной (б) поверхности пластины при различных значениях параметра Bi: (а) – η = 0, (б) – η = 1; *1–3* – Z_{Te}, *1'–3'* – Z_{Bi} для Bi = 0.5, 1, 5.

[4, 6]. Взяв соответствующие производные по этим параметрам, получим

$$Z_{Te} = \frac{\partial T}{\partial T_e} = \theta, \tag{7}$$

$$Z_{Bi} = \frac{1}{(T_e - T_0)}\frac{\partial T}{\partial \mathrm{Bi}} = -\sum_{n-1}^{\infty}(-1)^{n+1}\exp(-\mu_n^2\mathrm{Fo})\times$$
$$\times\Big\{(A_n)'_{\mathrm{Bi}}\cos[\mu_n(1-\eta)] - A_n\sin[\mu_n(1-\eta)]\times$$
$$\times(1-\eta)(\mu_n)'_{\mathrm{Bi}} - A_n\cos[\mu_n(1-\eta)](2\mu_n\mathrm{Fo}(\mu_n)'_{\mathrm{Bi}}\Big\},$$

$$(\mu_n)'_{\mathrm{Bi}} = \frac{\mu_n\sin^2\mu_n}{(\mathrm{Bi}^2 + \mathrm{Bi}\sin^2\mu_n)},\quad (A_n)'_{\mathrm{Bi}} = \frac{C'D - D'C}{D^2}, \tag{8}$$
$$C = 2\mathrm{Bi}\sqrt{\mu_n^2 + \mathrm{Bi}^2},\quad D = \mu_n(\mu_n^2 + \mathrm{Bi}^2 + \mathrm{Bi}),$$
$$C' = 2\left\{\sqrt{\mu_n^2 + \mathrm{Bi}^2} + \frac{\mathrm{Bi}(\mathrm{Bi} + \mu_n(\mu_n)'_{\mathrm{Bi}})}{\sqrt{\mu_n^2 + \mathrm{Bi}^2}}\right\},$$
$$D' = (\mu_n)'_{\mathrm{Bi}}(3\mu_n^2 + \mathrm{Bi}^2 + \mathrm{Bi}) + \mu_n(2\mathrm{Bi} + 1).$$

Графики зависимостей Z_{Bi}, Z_{Te} от числа Fo для наружной (η = 0) и тыльной (η = 1) поверхности пластины при различных значениях Bi приведены на рис. 3. Чем выше значения этих коэффициентов, тем точнее при данном уровне погрешности измерений можно определить искомый параметр. И наоборот, малая величина этих коэффициентов означает слабый отклик решения на изменение данных параметров и, следовательно, практическую трудность и высокую погрешность их определения из граничной обратной задачи теплообмена.

Из рисунка видно, что коэффициент чувствительности Z_{Te} увеличивается с ростом числа Fo, поэтому для определения температуры газового потока T_e предпочтительны большие времена. В противоположность этому зависимость Z_{Bi} имеет немонотонный характер с наличием максимума, положение и уровень которого зависит от числа Bi. Он находится из условия $\partial Z_{Bi}/\partial \mathrm{Fo} = 0$, либо графически. Соответствующие значения $Z_{Bi}(\mathrm{Fo}_{max})$, $\theta(\mathrm{Fo}_{max})$ для различных чисел Bi приведены в табл. 1. Из нее видно, что при Bi > 1 резко падает уровень коэффициента чувствительности Z_{Bi}, что осложняет решение граничной ОЗТ. Поэтому при постановке теплофизического эксперимента по определению коэффициента теплоотдачи α_e предпочтение следует отдавать случаям с Bi < 1.

Значение безразмерной температуры $\theta(\mathrm{Fo}_{max})$ в точке максимума коэффициента чувствительности $Z_{Bi}(\mathrm{Fo}_{max})$ при различных Bi согласно табл. 1 меняется довольно слабо. Для наружной поверхности (η = 0) пластины оно находится в диапазоне от 0.52 до 0.63, для тыльной поверхности – от 0.6 до 0.63 при изменении Bi в широких пределах 0.5 < Bi < 5. Полученные данные дают представление о времени и точках на температурной кривой, которые несут в себе максимум информации о коэффициенте теплоотдачи. Влияние погрешности измерений здесь также будет минимальным. Таким образом, экспериментальная информация для восстановления α_e представляет наибольший практический интерес в окрестности точки максимума зависимости Z_{Bi}.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ КОНВЕКТИВНОГО ТЕПЛООБМЕНА

Рассмотрим общий случай определения α_e, T_e по экспериментальным значениям температуры $Y(y_j, t_{i,j})$ в моменты времени $t_{i,j}$ для M датчиков с

Таблица 1. Координата $\mathrm{Fo}_{\max}$ максимума коэффициента чувствительности $Z_{\mathrm{Bi}}(\mathrm{Fo}_{\max})$ для наружной ($\eta = 0$) и тыльной ($\eta = 1$) поверхностей пластины при различных значениях Bi

Bi	$\eta = 0$			$\eta = 1$		
	$\mathrm{Fo}_{\max}$	$Z_{\mathrm{Bi}}(\mathrm{Fo}_{\max})$	$\theta(\mathrm{Fo}_{\max})$	$\mathrm{Fo}_{\max}$	$Z_{\mathrm{Bi}}(\mathrm{Fo}_{\max})$	$\theta(\mathrm{Fo}_{\max})$
0.5	1.91	0.64	0.62	2.49	0.63	0.63
1	0.81	0.29	0.60	1.49	0.27	0.63
3	0.08	0.09	0.53	0.80	0.06	0.61
5	0.03	0.06	0.52	0.65	0.03	0.60

координатами y_j ($1 \le j \le M$). Математически граничная обратная задача сводится к минимизации суммы квадратов отклонений экспериментальных значений $Y(y_j, t_{i,j})$ от расчетных $T(y_j, t_{i,j})$ в измеренных точках по времени для всех датчиков:

$$J(\mathrm{Bi}, T_e) = \\ = \sum_{j=1}^{M}\sum_{i=1}^{N_j}\left\{Y(y_j, t_{i,j}) - (T_e - T_0)\theta(\eta_j, \mathrm{Fo}_{i,j}, \mathrm{Bi})\right\}^2 \to \\ \to \min. \tag{9}$$

Используя условие минимума функционала (9), получим систему нормальных нелинейных уравнений метода наименьших квадратов [6, 19] для определения неизвестных $\{\mathrm{Bi},\ T_e\}$(так как α_e входит множителем в Bi):

$$\begin{cases} \dfrac{\partial J}{\partial \mathrm{Bi}} = -2\displaystyle\sum_{j=1}^{M}\sum_{i=1}^{N_j}\{Y(y_j, t_{i,j}) - \\ - (T_e - T_0)\theta(\eta_j, \mathrm{Fo}_{i,j}, \mathrm{Bi})\}\left(\dfrac{\partial T}{\partial \mathrm{Bi}}\right)_{i,j} = 0, \\ \dfrac{\partial J}{\partial T_e} = -2\displaystyle\sum_{j=1}^{M}\sum_{i=1}^{N_j}\{Y(y_j, t_{i,j}) - \\ - (T_e - T_0)\theta(\eta_j, \mathrm{Fo}_{i,j}, \mathrm{Bi})\}\left(\dfrac{\partial T}{\partial T_e}\right)_{i,j} = 0. \end{cases} \tag{10}$$

Входящие в (10) сомножители в круглых скобках представляют собой рассмотренные выше коэффициенты чувствительности (7), (8) решения в соответствующих точках по времени. Они играют роль весовых множителей при невязке между экспериментальными и расчетными значениями. В частном случае, когда температура потока T_e является известной, в (10) остается одно уравнение для определения Bi. Решение системы уравнений (10) осуществлялось численным образом. Следует отметить, что в предложенной методике используются только дискретные измерения температуры и ни на одном из ее этапов не применяется численное дифференцирование и сглаживание экспериментальной зависимости $Y(y_j, t_{i,j})$, влияющее на результат решения ОЗТ.

ПРИМЕРЫ ПРИМЕНЕНИЯ МЕТОДИКИ

Рассмотрим конвективный нагрев инертного материала с начальной температурой $T_0 = 0°\mathrm{C}$. Пусть параметры стационарного газового потока составляют $T_e = 1000°\mathrm{C}$, $\alpha_e = 100$ Вт/(м^2 К); теплофизические характеристики материала: $\rho = 100$ кг/м^3, $\lambda = 0.1$ Вт/(м К), $c = 1000$ Дж/(кг К) [15], толщина пластины $h = 5$ мм. При данных теплофизических характеристиках материала пластины коэффициент температуропроводности составляет $a = 10^{-6}$ м^2/с, критерий $\mathrm{Bi}_{\mathrm{exact}} = 5$, число $\mathrm{Fo} = t/25$, где t – время в с. Приведенный выше анализ показывает, что при указанном значении Bi коэффициент чувствительности Z_{Bi} имеет низкий уровень и пример является достаточно трудным для решения граничной ОЗТ.

Рассмотрим показания одиночного датчика на поверхности тела (рис. 4). Возьмем несколько произвольных значений времени измерений $t_i = \{0.2, 0.6, 0.8, 1.0, 1.2\}$ с, что в безразмерном виде соответствует числам $\mathrm{Fo}_i = \{0.008, 0.024, 0.032, 0.04, 0.048\}$. В качестве “экспериментальных” значений $Y_i(y_j, t_i)$ здесь и ниже будем использовать возмущенные значения точного решения $T_{\mathrm{exact}}(y_j, t_i)$ с относительной погрешностью ε, вычисленные по формуле $Y_{i,j}(y_j, t_i) = T_{\mathrm{exact}}(y_j, t_i)(1 \pm \varepsilon)$. Учитывалась несимметричная ошибка в исходных данных. На рис. 4 кривой *1* показано точное решение, дискретные экспериментальные значения температуры с различной погрешностью от текущих значений указаны значками. Так как коэффициент теплоотдачи α_e входит в критерий Bi, то при решении ОЗТ восстанавливалось его значение.

Результаты решения ОЗТ на основе численной реализации системы (10) отнесены к своим точным значениям $(T_e)_{\mathrm{exact}}$, $\mathrm{Bi}_{\mathrm{exact}}$ и приведены в табл. 2. В последнем столбце рассмотрен случай определения Bi при известной температуре потока T_e на основе решения одного уравнения в (10). Видно, что при отсутствии погрешности в исходных данных ($\varepsilon = 0$) параметры Bi, T_e восстанавливаются точно. Наличие ошибки в измерениях, в том числе достаточно высокой в 10% ($\varepsilon = 0.1$) и 20% ($\varepsilon = 0.2$) не увеличивает погрешность решения граничной

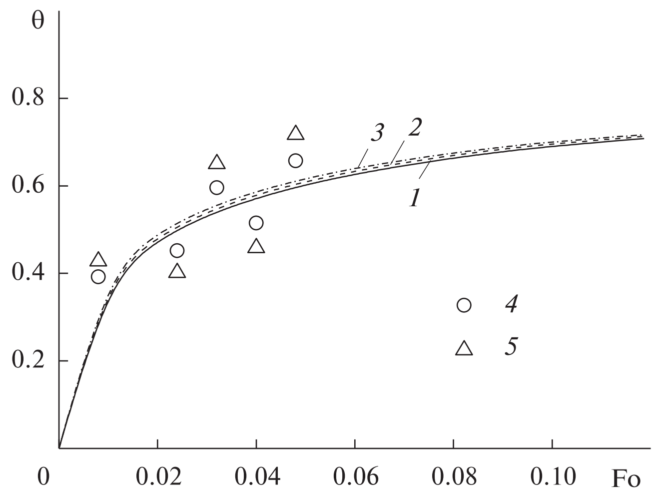


Рис. 4. Температура наружной поверхности пластины (одиночный датчик): *1* – точные; *2*, *3* – восстановленные значения температуры при $\varepsilon = 0.1$ и 0.2; *4*, *5* – экспериментальные данные с относительной погрешностью $\varepsilon = 0.1$ и 0.2.

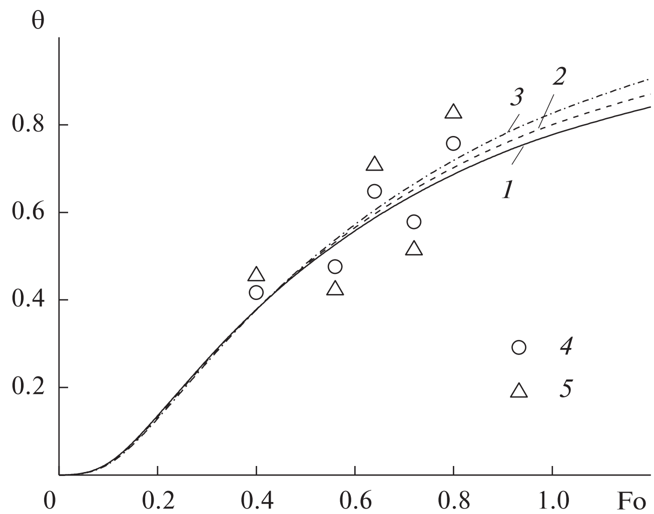


Рис. 5. Температура тыльной поверхности пластины (одиночный датчик): *1*–*5* – то же, что на рис. 4.

ОЗТ. Из таблицы видно, что один искомый параметр Bi восстанавливается с большей точностью, чем два $\{\mathrm{Bi},\ T_e\}$. Близость кривых *2*, *3* на рис. 4 к точному решению *1* с использованием восстановленных значений $\{\mathrm{Bi},\ T_e\}$ при $\varepsilon = 0.1$ и 0.2 (см. табл. 2) показывает хорошую точность и устойчивость методики к погрешности исходных данных.

Для датчиков, размещенных внутри ($\eta = 0.4$) и на тыльной поверхности ($\eta = 1$) пластины, использовались более поздние времена измерений $t_i = \{6, 10, 12, 14, 16\}$ с и $t_i = \{10, 14, 16, 18, 20\}$ с, которые по числу Fo составляют значения $\mathrm{Fo}_i = \{0.24, 0.4, 0.48, 0.56, 0.64\}$ и $\mathrm{Fo}_i = \{0.4, 0.56, 0.64, 0.72, 0.8\}$ соответственно. Результаты решения ОЗТ представлены в табл. 3 и 4, а для тыльной поверхности пластины показаны на рис. 5. Из таблиц (последний столбец) следует, что точность восстановления параметра Bi для заглубленных датчиков по сравнению с наружной поверхностью (табл. 2) заметно снижается. То же самое относится и к случаю одновременного определения двух параметров $\{\mathrm{Bi},\ T_e\}$. Необходимо отметить, что погрешность исходных данных в 20% ($\varepsilon = 0.2$) все-таки является избыточной, так как реальная ошибка измерений в экспериментах находится на уровне 5–10% ($\varepsilon \approx 0.05$–0.1). Тем не менее методика позволяет получать приемлемые результаты даже в этом случае, что подтверждается ходом кривых *2*, *3* температуры на рис. 5 с использованием восстановленных значений параметров $\{\mathrm{Bi},\ T_e\}$ из табл. 4. Во всех случаях точность определения температуры среды T_e выше, чем параметра Bi (коэффициента теплоотдачи), что находится в полном соответствии с анализом коэффициентов чувствительности.

Представляет интерес совместное использование показаний датчиков для рассмотренных выше случаев при решении граничной ОЗТ, так как это увеличивает количество независимых точек измерений в различные моменты времени. Результаты расчетов приведены в табл. 5–7, а в случае размещения двух датчиков на наружной и тыльной поверхностях показаны на рис. 6. Кривые *2*, *3* и *2*', *3*' на рис. 6, полученные с использованием восстановленных значений $\{\mathrm{Bi},\ T_e\}$ (табл. 6), воспроизводят точное решение *1* и *1*', что говорит о хорошей точности их определения. Практически важно, что вполне приемлемый результат достигается и при использовании датчиков на внутренней и тыльной поверхностях (табл. 7). Таким

Таблица 2. Решение граничной ОЗТ: датчик на наружной поверхности пластины ($\eta = 0$)

ε	$\{T_e/(T_e)_{\mathrm{exact}},\ \mathrm{Bi}/\mathrm{Bi}_{\mathrm{exact}}\}$	$\mathrm{Bi}/\mathrm{Bi}_{\mathrm{exact}}$
0	{1.0, 1.0}	1.0
0.05	{0.997, 1.02}	1.01
0.10	{0.994, 1.04}	1.03
0.20	{0.983, 1.10}	1.06

Таблица 3. Решение ОЗТ: датчик внутри пластины на глубине ($\eta = 0.4$)

ε	$\{T_e/(T_e)_{\mathrm{exact}},\ \mathrm{Bi}/\mathrm{Bi}_{\mathrm{exact}}\}$	$\mathrm{Bi}/\mathrm{Bi}_{\mathrm{exact}}$
0	{1.0, 1.0}	1.0
0.05	{1.01, 0.98}	1.04
0.10	{1.03, 0.96}	1.08
0.20	{1.05, 0.92}	1.17

Таблица 4. Решение ОЗТ: датчик на тыльной поверхности пластины ($\eta = 1$)

ε	$\{T_e/(T_e)_{exact}, Bi/Bi_{exact}\}$	Bi/Bi_{exact}
0	{1.0, 1.0}	1.0
0.05	{1.03, 0.92}	1.04
0.10	{1.06, 0.83}	1.08
0.20	{1.14, 0.68}	1.16

Таблица 5. Результаты расчетов: датчики на наружной поверхности ($\eta = 0$) и внутри ($\eta = 0.4$) пластины

ε	$\{T_e/(T_e)_{exact}, Bi/Bi_{exact}\}$	Bi/Bi_{exact}
0	{1.0, 1.0}	1.0
0.05	{1.01, 0.998}	1.02
0.10	{1.02, 0.996}	1.04
0.20	{1.03, 0.992}	1.08

Таблица 6. Результаты расчетов: датчики на наружной ($\eta = 0$) и тыльной ($\eta = 1$) поверхностях пластины

ε	$\{T_e/(T_e)_{exact}, Bi/Bi_{exact}\}$	Bi/Bi_{exact}
0	{1.0, 1.0}	1.0
0.05	{1.01, 0.997}	1.02
0.10	{1.02, 0.993}	1.04
0.20	{1.04, 0.987}	1.08

Таблица 7. Результаты расчетов: датчики внутри ($\eta = 0.4$) и на тыльной ($\eta = 1$) поверхности пластины

ε	$\{T_e/(T_e)_{exact}, Bi/Bi_{exact}\}$	Bi/Bi_{exact}
0	{1.0, 1.0}	1.0
0.05	{1.02, 0.954}	1.04
0.10	{1.04, 0.907}	1.08
0.20	{1.08, 0.811}	1.17

образом, совместное использование показаний нескольких датчиков в различные моменты времени стабилизирует ошибки измерений, повышает информативность и точность идентификации параметров $\{Bi, T_e\}$ конвективного теплообмена.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложена методика определения коэффициента теплоотдачи α_e и температуры T_e стационарного газового потока по дискретным измерениям температуры материала теплоизолированной пластины, не содержащая операций численного дифференцирования и сглаживания экспериментальных данных.

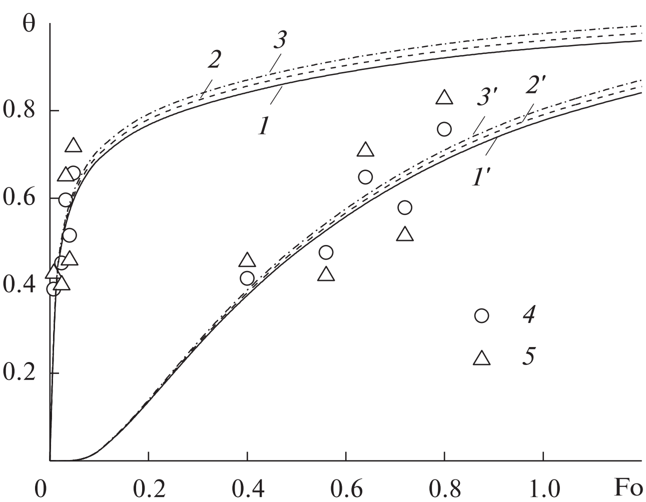


Рис. 6. Температура наружной и тыльной поверхностей пластины (два датчика): *1*, *1'* – точные; *2*, *2'* и *3*, *3'* – восстановленные значения температуры при $\varepsilon = 0.1$ и 0.2; *4*, *5* – экспериментальные данные с относительной погрешностью $\varepsilon = 0.1$ и 0.2.

На основе анализа коэффициентов чувствительности решения к изменению искомых параметров определен наиболее информативный временнóй диапазон, внутри которого влияние погрешности измерений на значения параметров минимально, что очень важно для планирования и постановки теплофизического эксперимента.

Предложенная методика обработки данных проиллюстрирована на примерах возмущенных показаний датчиков, размещенных на наружной, внутренней и тыльной поверхностях пластины. Полученные результаты показывают, что методика устойчива к погрешности исходных данных, не требует их сглаживания, выбора диапазона измерений по числу Фурье и позволяет повысить точность решения граничной обратной задачи теплопроводности по определению параметров конвективного теплообмена.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Полежаев Ю.В., Юревич Ф.Б.* Тепловая защита. М.: Энергия, 1976. 392 с.
2. *Лыков А.В.* Теория теплопроводности. М.: Высшая школа, 1967. 600 с.
3. *Лыков А.В.* Тепломассообмен. Спр. М.: Энергия, 1978. 480 с.
4. *Алифанов О.М.* Обратные задачи теплообмена. М.: Машиностроение, 1988. 280 с.

5. *Алифанов О.М., Артюхин Е.А., Румянцев С.В.* Экстремальные методы решения некорректных задач и их приложение к обратным задачам теплообмена. М.: Наука, 1988. 288 с.
6. *Beck J.V., Blackwell B., St. Clair C.R.* Inverse Heat Conduction. Ill-posed Problems. N.Y.: J. Wiley and Sons Publ., 1985. 308 p.
7. *Кабанихин С.И.* Обратные и некорректные задачи. Новосибирск: Сиб. науч. изд-во, 2009. 458 с.
8. *Коздоба Л.А., Круковский П.Г.* Методы решения обратных задач теплопереноса. Киев: Наукова думка, 1982. 359 с.
9. *Alifanov O.M.* Inverse Problems in Identification and Modeling of Thermal Processes: Russian Contributions // Int. J. Numer. Methods Heat Fluid Flow. 2017. V. 27. № 3. P. 711.
10. *Давлетшин И.А., Михеев Н.И.* Структура течения и теплообмен при отрыве пульсирующего потока // ТВТ. 2012. Т. 50. № 3. С. 442.
11. *Linda M., Hromasova M.* Model Analysis of Temperature Sensors // Engineering for Rural Development. 2016. Jan. P. 566.
12. *Дилигенская А.Н.* Метод минимаксной оптимизации в двумерной граничной обратной задаче теплопроводности // ТВТ. 2019. Т. 57. № 2. С. 226.
13. *Туголуков Е.Н., Карпук В.А., Рухов А.В.* Решение обратных задач теплопроводности для многослойных тел канонической формы // Вестн. Тамбовск. гос. техн. ун-та. 2013. Т. 19. № 3. С. 577.
14. *Артюхин Е.А., Баранов В.В., Ганчев Б.Г., Ненарокомов А.В.* Исследование нестационарного теплообмена при смачивании нагретых поверхностей // ТВТ. 1987. Т. 25. № 5. С. 975.
15. *Зверев В.Г., Назаренко В.А., Панько С.В., Теплоухов А.В.* Определение параметров конвективного теплообмена по измерениям температуры материала // ТВТ. 2010. Т. 48. № 5. С. 779.
16. *Carslaw H.S., Jaeger J.C.* Conduction of Heat in Solids. N.Y.: Oxford Univ., 1959.
17. *Пехович А.И., Жидких В.М.* Расчеты теплового режима твердых тел. Л.: Энергия, 1976.
18. *Кондратьев Г.М.* Регулярный тепловой режим. М.: Гостехиздат, 1954.
19. *Kahaner D., Moler C., Nash S.* Numerical Methods and Software. N.Y.: Prentice Hall, 1988.

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР, 2021, том 59, № 1, с. 148–151

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 536.2.023; 532.591

ПОВЕДЕНИЕ ТАНТАЛА ВБЛИЗИ КРИТИЧЕСКОЙ ТОЧКИ ПРИ ФЕМТОСЕКУНДНОМ ЛАЗЕРНОМ НАГРЕВЕ

© 2021 г. **Е. В. Струлева[1,] *, П. С. Комаров[1], С. И. Ашитков[1]**

[1]*ФГБУН Объединенный институт высоких температур РАН (ОИВТ РАН), Москва, Россия*

**E-mail: struleva.evgenia@yandex.ru*

Поступило в редакцию 01.06.2020 г.
После доработки 01.06.2020 г.
Принято к публикации 20.10.2020 г.

Методом спектральной микроинтерферометрии с пикосекундным разрешением исследована динамика изменения комплексного коэффициента отражения тантала при воздействии фемтосекундными лазерными импульсами умеренной интенсивности. Изучены особенности поведения амплитуды и фазы диагностической волны в режимах откольной и фрагментационной абляции. На основе анализа пикосекундной динамики разлета проведена оценка порога и характерного времени развития взрывного вскипания танталовой мишени.

DOI: 10.31857/S0040364420060228

ВВЕДЕНИЕ

Широкий спектр практического применения лазерной абляции включает в себя микрообработку материалов, очистку и создание функциональных поверхностей, импульсное лазерное осаждение тонких пленок и получение наноразмерных частиц. В зависимости от плотности энергии нагревающего фемтосекундного лазерного импульса (ФЛИ) различают два режима абляции: откольный и фрагментационный. Откольный характер разрушения вещества обусловлен кавитационным процессом образования и роста зародышей паровой фазы в расплаве и абляцией части расплава в виде тонкого слоя в конденсированном состоянии под действием возникающих растягивающих напряжений [1–6]. С ростом плотности энергии механизм удаления вещества изменяется. Нуклеация развивается не только в области отрицательных давлений в волне разряжения в глубине расплава, но и при положительном давлении. Материал поверхностного слоя под действием мощных фемтосекундных импульсов переходит в состояние перегретой жидкости, достигая предела термодинамической устойчивости, и удаление вещества происходит в форме паро-капельной смеси (так называемый фазовый взрыв) [2, 5–9]. Пороговая плотность энергии, разделяющая эти режимы, соответствует нагреву вещества до температур, близких к критической точке.

Особенности фрагментационной абляции теоретически исследовались ранее в ряде работ [5–7] и экспериментально наблюдались на отдельных металлах и полупроводниках [2, 8, 9]. В то же время малоизученным остается вопрос об абляции тугоплавких металлов, в частности тантала (T_3 = = 3290 K в тройной точке), используемого в энергетике, микроэлектронике и медицине.

В данной работе методом спектральной микроинтерферометрии исследовалась динамика расширения поверхностного слоя тантала и изменение его отражательной способности в пикосекундном диапазоне при различном превышении плотностью энергии порога откола. Найдены качественные различия в эволюции абляционного факела в режиме откольной и фрагментационной абляции. Определены характерное время и диапазон энергий, соответствующие развитию взрывного вскипания при фрагментационной абляции.

ЭКСПЕРИМЕНТ

Источником ФЛИ являлась титан-сапфировая лазерная система, входящая в состав ЦКП “Лазерный фемтосекундный комплекс”. Лазерная система генерирует фемтосекундные импульсы с энергией до 2 мДж на длине волны 800 нм. В эксперименте *p*-поляризованный лазерный импульс длительностью 60 фс на длине волны излучения 800 нм фокусировался на поверхность мишени под углом 60° линзой с фокусным расстоянием 20 см. Пространственное распределение плотности энергии в фокальном пятне соответствовало гауссову с радиусом 19 мкм по уровню e^{-1}. Для изменения плотности энергии нагревающего и зондирующего импульсов в схеме применялись аттенюаторы, состоящие из полуволновой пластины

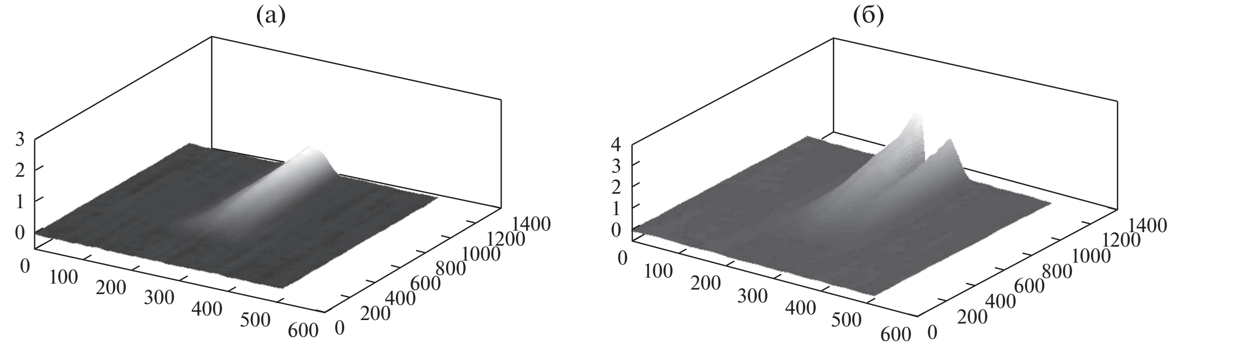


Рис. 1. Пространственно-временны́е распределения изменения фазы $\Delta\varphi(x,t)$ диагностической волны при различном превышении плотностью энергии порогового значения $F_0/F_{\rm spall}$: (а) – 1.4, (б) – 3.9.

и призмы Глана. Энергия в каждом импульсе измерялась калиброванным фотодиодом.

В качестве экспериментального образца использовалась пленка тантала толщиной 1300 нм, нанесенная на стеклянную подложку методом магнетронного напыления.

Для диагностики часть чирпированного импульса длительностью 300 пс с шириной спектра 40 нм и центральной длиной волны λ_0 = 800 нм отводилась из лазерного тракта перед компрессором. В экспериментальной схеме был собран интерферометр Майкельсона, совмещенный с дифракционным спектрометром Solar MS3504i. Спектрометр мог работать как в режиме регистрации спектров, так и в режиме переноса изображения при установке зеркала. Применяемая методика измерений обеспечивала непрерывную регистрацию динамики процесса во временно́м интервале $\Delta t = 0$–200 пс с временны́м разрешением $\delta t \approx 2$ пс. Более подробно экспериментальная схема и методика измерений описана в работах [10, 11].

Применяемый алгоритм фурье-анализа двумерных интерферограмм [12, 13] с процедурой нормировки временно́го кадра на начальный (невозмущенная поверхность) обеспечивает погрешность определения изменения фазы диагностического импульса на уровне $\delta\varphi \approx 0.02$ рад, что соответствует погрешности определения величины смещения поверхности на уровне $\delta z \approx (1$–$2)$ нм, а также изменения коэффициента отражения с точностью $\delta R \approx (1-2)\%$.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Порог откольной абляции по падающей плотности энергии определен с помощью методики, описанной в [14] (спектрометр в данном случае переключался в режим переноса изображения поверхности путем смены дифракционной решетки на зеркало при повороте турели). Пороговая плотность энергии составила $F_{\rm spall} = 0.36 \pm 0.04$ Дж/см^2. Измеренное вблизи абляционного порога значение коэффициента отражения, как отношение энергии отраженной от образца к энергии падающей, составило $R = 0.42$.

На рис. 1 показаны пространственно-временны́е распределения изменения фазы $\Delta\varphi(x,t)$ диагностической волны, полученные после обработки интерферограмм, при двух различных значениях относительной плотности энергии ФЛИ $F_0/F_{\rm spall}$ (F_0 – значение в центре фокального пятна). Положительный сдвиг фазы на графиках соответствует расширению вещества мишени. Масштаб по осям X и t соответственно составляет 0.4 мкм/пкс и 0.167 пс/пкс.

Куполообразная форма расширения вещества на рис. 1а характерна для разлета откольной пластины при термомеханической абляции. Однако при увеличении плотности энергии (рис. 1б) на пространственно-временном распределении фазы возникает особенность в виде "провала", связанного с развитием фрагментационной абляции, что обсуждается ниже.

На рис. 2 представлены временны́е зависимости изменения фазы $\Delta\varphi(t)$, характеризующие динамику расширения поверхностного слоя тантала после воздействия ФЛИ с различными плотностями энергии. Зависимости $\Delta\varphi(t)$ сопоставляются с динамикой изменения коэффициента отражения $R(t)/R_0$, где R_0 – исходное значение коэффициента отражения вне области лазерного воздействия. Временны́е профили на рис. 2 соответствуют центральной части области взаимодействия.

На рис. 2 при $F_0 = 1.4F_{\rm spall}$ (кривая *1'*) наблюдается монотонное изменение фазы $d\varphi/dt > 0$ на всем временно́м интервале измерений. Отражательная способность (кривая *2'*) при этом снижается не более чем на 20–30% относительно на-

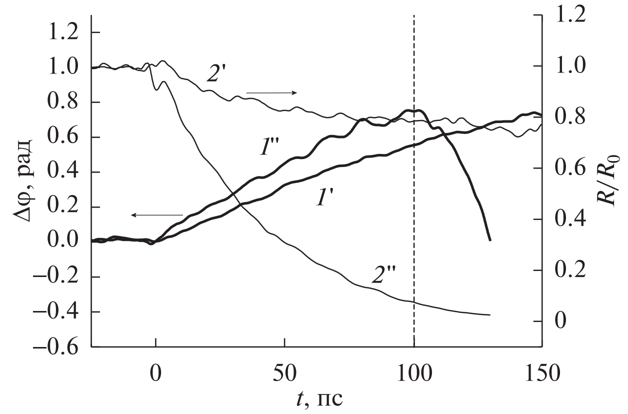


Рис. 2. Графики зависимостей изменения фазы $\Delta\varphi(t)$ (*1*) и коэффициента отражения $R(t)/R_0$ (*2*) при: *1*', *2*' – $F_0/F_{\text{spall}} = 1.4$; *1*", *2*" – 3.9.

чального значения R_0. Наблюдаемое поведение $\Delta\varphi(t)$ и $R(t)$ характерно для термомеханической (откольной) абляции, при которой выброс вещества происходит в виде конденсированного слоя с плотностью, превышающей критическое значение, и резким градиентом на границе с воздухом [6]. Максимальная величина смещения границы слоя, согласно выражению $z = \Delta\varphi\lambda/4\pi$, при этом составляет 47 нм.

При плотности энергии $F_0 = 3.9F_{\text{spall}}$ (кривая *1*") в отличие от предыдущего случая при задержке примерно 100 пс наблюдается изменение знака производной $d\varphi/dt$ с "плюса" на "минус". При этом с течением времени коэффициент отражения резко уменьшается почти до нулевых значений (кривая *2*"). При $t \geq 120$ пс наблюдается исчезновение интерференционных полос в центральной части области взаимодействия, что делает невозможным обработку интерферограмм на таких временах.

Из рис. 2 следует, что средняя скорость смещения границы мишени на начальном участке в интервале $0 < t \leq 20$ пс при $F_0 = 3.9F_{\text{spall}}$ составляет 0.63 км/с. Это более чем в полтора раза превосходит значение для $F_0 = 1.4F_{\text{spall}}$, равное 0.39 км/с.

Согласно грубым оценкам, выполненным в работе [16], температура тантала вблизи порога F_{spall} равна $T_i \approx 5$ кК, что примерно в полтора раза превосходит его температуру плавления в равновесных условиях $T_{\text{melt}} = 3269$ К [17], но существенно ниже температуры критической точки $T_c \approx 12.6$ кК [18, 19]. При этом согласно [15] для тантала соотношение порогов $F_{\text{frag}}/F_{\text{spall}} \approx 2.6$, и температура поверхности вблизи F_{frag} должна быть близка к критической. Отсюда естественно считать, что непосредственно вблизи порога F_{frag} изоэнтропа расширения тантала проходит ниже критической точки, что ведет к взрывному вскипанию поверхностного слоя.

Анализ результатов измерений динамики расширения танталовой мишени свидетельствует о том, что порог фрагментационной абляции лежит в интервале $1.4F_{\text{spall}} < F_{\text{frag}} \leq 3.9F_{\text{spall}}$, что согласуется с данными работы [15]. При этом при максимальном значении флюенса $F_0 \approx 3.9F_{\text{spall}} \approx 1.5F_{\text{frag}}$ начальная температура поверхностного слоя может в полтора раза превышать критическую. Наблюдаемое в эксперименте немонотонное изменение фазы и падение отражения на временах $\sim 10^{-10}$ с может быть связано с взрывным вскипанием при расширения флюида в случае прохождения изоэнтропы ниже T_c. В то же время не исключена возможность расширения флюида по сверхкритической изоэнтропе с пересечением паровой ветви бинодали, сопровождаемое интенсивным испарением и сильным возмущением поверхности. Ответы на данные вопросы требуют проведения более детальных исследований и компьютерного моделирования.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Интерферометрическим методом непрерывной регистрации с пикосекундным временны́м разрешением исследованы динамика движения поверхности и изменение коэффициента отражения пленочного образца тантала, инициируемые воздействием импульсов фемтосекундного лазера. Оценены значения порогов и характерных скоростей разлета мишени в режимах откольной и фрагментационной абляции. В отличие от режима откольной абляции наблюдаемые на временах 10^{-10} с немонотонное изменение фазы и резкое уменьшение отражения может быть связано с образованием паровой фазы или сильно рассеивающей паро-капельной смеси при изоэнтропическом расширении флюида в окрестности критической точки при фрагментационной абляции.

Работа выполнена на оборудовании ЦКП "Фемтосекундный лазерный комплекс" ОИВТ РАН при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН № 075-15-2020-785 от 23 сентября 2020 г.).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Анисимов С.И., Лукьянчук Б.С.* Избранные задачи теории лазерной абляции // УФН. 2002. Т. 172. № 3. С. 301.
2. *Sokolowski-Tinten K., Bialkowski J., Cavalleri A., von der Linde D., Oparin A., Meyer-ter-Vehn J., Anisimov S.I.* Transient States of Matter During Short Pulse Laser Ablation // Phys. Rew. Lett. 1998. V. 81. P. 224.

3. *Bulgakova N.M., Stoian R., Rosenfeld A., Hertel I.V., Campbell E.B.* Electronic Transport and Consequences for Material Removal in Ultrafast Pulsed Laser Ablation of Materials // Phys. Rev. B. 2004. V. 69. 054102.
4. *Agranat M.B., Anisimov S.I., Ashitkov S.I., Zhakhovskii V.V., Inogamov N.A., Nishihara K., Petrov Yu.V., Khokhlov V.A., Fortov V.E.* Dynamics of Plume and Crater Formation after Action of Femtosecond Laser Pulse // Appl. Surf. Sci. 2007. V. 253. Is. 15. P. 6276.
5. *Povarnitsyn M.E., Itina T.E., Sentis M., Khishchenko K.V., Levashov P.R.* Material Decomposition Mechanisms in Femtosecond Laser Interactions with Metals // Phys. Rev. B. 2007. V. 75. № 23. P. 235414.
6. *Иногамов Н.А., Жаховский В.В., Ашитков С.И., Петров Ю.В., Агранат М.Б., Анисимов С.И., Нишихара К., Фортов В.Е.* О наноотколе после воздействия ультракороткого лазерного импульса // ЖЭТФ. 2008. Т. 134. Вып. 1. С. 5.
7. *Zhigilei L.V., Lin Z., Ivanov D.S.* Atomistic Modeling of Short Pulse Laser Ablation of Metals: Connections between Melting, Spallation, and Phase Explosion // J. Phys. Chem. C. 2009. V. 113. № 27. P. 11892.
8. *Ионин А.А., Кудряшов С.И., Самохин А.А.* Абляция поверхности материалов под действием ультракоротких лазерных импульсов // УФН. 2017. Т. 187. № 2. С. 159.
9. *Ионин А.А., Кудряшов С.И., Селезнев Л.В., Синицын Д.В.* Динамика откольной абляции поверхности GaAs под действием фемтосекундных лазерных импульсов // Письма в ЖЭТФ. 2011. Т. 94. Вып. 10. С. 816.
10. *Ашитков С.И., Комаров П.С., Овчинников А.В., Струлёва Е.В., Жаховский В.В., Иногамов Н.А., Агранат М.Б.* Абляция металлов и образование наноструктур под действием фемтосекундных лазерных импульсов // Квантовая электроника. 2014. Т. 44. № 6. С. 535.
11. *Струлёва Е.В., Комаров П.С., Ашитков С.И.* Интерферометрическая диагностика нанодеформаций поверхности мишени в пикосекундном диапазоне при импульсном лазерном воздействии // Вестник Объединенного института высоких температур. 2018. Т. 1. № 1. С. 130.
12. *Temnov V.V., Sokolowski-Tinten K., Zhou P., Von der Linde D.* Ultrafast Imaging Interferometry at Femtosecond-Laser-Excited Surfaces // J. Opt. Soc. Am. B. 2006. V. 23. № 9. P. 1954.
13. *Агранат М.Б., Андреев Н.Е., Ашитков С.И., Вейсман М.Е., Левашов П.Р., Овчинников А.В., Ситников Д.С., Фортов В.Е., Хищенко К.В.* Определение транспортных и оптических свойств неидеальной плазмы твердотельной плотности при фемтосекундном лазерном воздействии // Письма в ЖЭТФ. 2007. Т. 85. Вып. 6. С. 328.
14. *Liu J.M.* Simple Technique for Measurements of Pulsed Gaussian-Beam Spot Sizes // Opt. Lett. 1982. V. 7. № 5. P. 196.
15. *Струлёва Е.В., Комаров П.С., Ашитков С.И.* Особенности абляции тантала при фемтосекундном лазерном воздействии // ТВТ. 2018. Т. 56. № 5. С. 672.
16. *Ashitkov S.I., Komarov P.S., Struleva E.V., Inogamov N.A., Agranat M.B., Kanel G.I., Khishchenko K.V.* The Behavior of Tantalum under Ultrashort Loads Induced by Femtosecond Laser // J. Phys.: Conf. Ser. 2015. V. 653. 012001.
17. *Кикоин И.К.* Таблица физических величин. Спр. М.: Атомиздат, 1976. 177 с.
18. *Фортов В.Е., Дремин А.Н., Леонтьев А.А.* Оценка параметров критической точки // ТВТ. 1975. Т. 13. № 5. С. 1072.
19. *Ohse R.W., Tippelskirch H.* The Critical Constants of the Elements and Some Refractory Materials with High Critical Temperatures // High Temp.—High Press. 1977. V. 9. P. 367.

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР, 2021, том 59, № 1, с. 152–154

УДК 532.7:783:539.213

ОБРАЗОВАНИЕ ЗАРОДЫШЕЙ С ВАКАНСИЯМИ ПРИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ПЕРЕОХЛАЖДЕННЫХ РАСПЛАВОВ

© 2021 г. В. Д. Александров[1], С. А. Фролова[1, *]

[1]ГОУ ВПО “Донбасская национальная академия строительства и архитектуры”, г. Макеевка, Украина

*E-mail: primew65@mail.ru

Поступило в редакцию 10.04.2020 г.
После доработки 10.04.2020 г.
Принято к публикации 14.10.2020 г.

В работе проанализировано изменение свободной энергии Гиббса при образовании зародышей с вакансиями из расплава. Получены формулы для нахождения размеров l_k критических зародышей и работы A_k их образования в зависимости от концентрации вакансий и от переохлаждений. Показано отличие l_k и A_k для реальных зародышей от $l_K^{ид}$ и $A_K^{ид}$ для идеальных.

DOI: 10.31857/S0040364421010014

ВВЕДЕНИЕ

Этап зародышеобразования является одним из важнейших при кристаллизации расплавов. Теоретические модели зарождения новой фазы очень разнообразны [1–3]. В этой связи разработки новых методологий и методов расчета размеров зародышей при кристаллизации металла из переохлажденного расплава весьма актуальны. В данной работе рассмотрен вариант анализа энергии Гиббса при образовании зародышей кристаллов с вакансиями.

АНАЛИЗ СТАНДАРТНОЙ МЕТОДИКИ

Как известно [4], изменение свободной энергии Гиббса ΔG при гомогенном образовании идеальных зародышей кристаллов имеет следующий вид:

$$\Delta G = -\Delta G_V + \Delta G_F, \tag{1}$$

где $\Delta G_V = V\rho L\Delta T^- / T_L$, $\Delta G_F = \sigma F$ – объемная и поверхностная составляющие соответственно; V, F – объем и площадь поверхности зародыша; ρ – плотность твердой фазы; L – удельная теплота кристаллизации; T_L – температура плавления; ΔT^- – переохлаждение жидкой фазы; σ – межфазная поверхностная энергия.

При условии $\partial(\Delta G)/\partial l_{l=l_K} = 0$ определяется [5] критический размер зародыша $l_K^{ид}$. Например, для зародыша кубической формы ($V = l^3$, $F = 6l^2$) получаются следующие выражения для $l_K^{ид}$ и работы его образования $A_K^{ид}$:

$$l_K^{ид} = 4\sigma T_L / (\rho L \Delta T^-), \tag{2}$$

$$A_K^{ид} = 32(\sigma T_L)^3 / (\rho L \Delta T^-)^2. \tag{3}$$

Элементарный анализ показывает несостоятельность данных формул. Так, при приближении температуры T к температуре плавления T_L (т.е. $\Delta T^- \to 0$) значения $l_K^{ид}$ и $A_K^{ид}$ стремятся к бесконечно большим величинам, чего на самом деле не наблюдается.

АНАЛИЗ АЛЬТЕРНАТИВНОЙ МОДЕЛИ РАСЧЕТОВ

В данной работе сделана попытка учесть вклад вакансий в ΔG. Вакансии влияют на энтропию ΔS кристалла, а следовательно, должны внести вклад в объемную составляющую ΔG_V. При условии $\Delta G_V = \tilde{L}m$, $\Delta H = Lm$ (m – масса тела) и $\Delta G_V = \Delta H - T\Delta S$ получим выражение для удельной теплоты плавления реального кристалла

$$\tilde{L} = L - T\Delta S / N m_0, \tag{4}$$

где ΔH – энтальпия фазового перехода, N – число молекул в зародыше, m_0 – молекулярная масса вещества.

Тогда выражение (1) записывается в виде

$$\Delta G = -\rho\tilde{L}l^3 + 6\sigma l^2. \tag{5}$$

Откуда критический размер l_k реального зародыша можно рассчитать как

$$l_K = 4\sigma / \rho\tilde{L}, \tag{6}$$

а работу A_K его образования – $A_K = 32\sigma^3 / \rho^2\tilde{L}^2$.

Характер влияния вакансий на величины l и ΔG можно проследить по изменению энтропии

ΔS зародыша от идеального к вакансионному. Это изменение при частичном заполнении молекулами узлов решетки по сравнению с идеальной решеткой состоит из конфигурационной ΔS_C и колебательной ΔS_V составляющих [6, 7].

Конфигурационная энтропия равна

$$\Delta S_C = k_Б \ln\left[N_i!/(N_i - N_0)!\,N_0!\right], \qquad (7)$$

где N_i – число узлов в решетке зародыша, N_0 – число вакантных узлов, $k_Б$ – постоянная Больцмана.

С помощью формулы Стирлинга ($\ln x! \approx x\ln x$) получим выражение (7) через атомную концентрацию вакансий $c_V = N_0/N_i$:

$$\Delta S_C = -k_Б N_i\left[(1-c_V)\ln(1-c_V) + c_V \ln c_V\right],$$

а в первом приближении

$$\Delta S_C \approx 2k_Б N_i c_V. \qquad (8)$$

Сложнее оценить колебательную составляющую энтропии ΔS_V. Для такого малого объекта, как зародыш, по-видимому, возможна качественная оценка величины ΔS_V. Если в идеальном зародыше все N_i узлов заняты молекулами, то в приближении несвязанных осцилляторов все частоты $\nu' = (\beta'/m_0)^{1/2}$ колебания N молекул одинаковы. Наличие вакантных узлов ослабляет жесткость связей β смежных молекул, и частота их колебаний в реальном зародыше изменяется $\nu'' = (\beta''/m_0)^{1/2}$. При $\nu'' \neq \nu'$ имеем отношение $\nu''/\nu' = (\beta''/\beta')^{1/2}$. В этих условиях ΔS_ν есть разность энтропий собственных колебаний молекул реальной и идеальной решеток. При высоких температурах ($k_Б T \gg h\nu$, h – постоянная Планка) она принимает вид

$$\Delta S_\nu = -\sum_{i=0}^{N}\left[\ln(h\nu''/k_Б T) - \ln(h\nu'/k_Б T)\right].$$

В результате суммирования имеем

$$\Delta S_\nu = -N_i k_Б \ln(\nu''/\nu').$$

Допуская, что $\beta''/\beta' = \left[(N_i - N_0)/N_i\right]^\alpha$, получаем

$$\Delta S_\nu = 0.5\alpha k_Б N_i c_V, \qquad (9)$$

где α – поправочный коэффициент. Из (8) и (9) получаем $\alpha = 4\Delta S_\nu/\Delta S_C$. Сравнивая колебательную и конфигурационную энтропии для ряда веществ [8], можно оценить коэффициент α. Например, для висмута $\alpha = 10.58$, а для сурьмы – 10.43.

Суммируя (8) и (9), получим

$$\Delta S = \Delta S_C + \Delta S_\nu = Zk_Б N_i c_V, \qquad (10)$$

где $Z = 2 + 0.5\alpha$. Эта величина близка к значениям координационных чисел (КЧ) веществ в расплавленном состоянии (для тех же висмута $Z = 7.29$, КЧ = 7–8 и сурьмы $Z = 7.22$, КЧ = 6.8–9.4 [9]).

С учетом (10) выражение (4) для удельной теплоты $\tilde{L}$ можно записать в виде

$$\tilde{L} = L - Zk_Б T c_V/m_0. \qquad (11)$$

Очевидно, что с уменьшением концентрации вакансий $\tilde{L} \to L$, т.е. $\tilde{L}$ стремится к теплоте плавления бездефектного кристалла.

Проанализируем критические размеры реальных зародышей $l_к$ из (6) с учетом (11)

$$l_К = 4\sigma/\rho\tilde{L} = 4\sigma/\rho(L - Zk_Б T c_V/m_0). \qquad (12)$$

При $T \to 0$

$$c_V \to 0,\quad l_К \to l_К^0 = 4\sigma/\rho L \qquad (13)$$

и зародыш $l_К^0$ может иметь место лишь при температуре абсолютного нуля. Результаты расчетов величины $l_К^0$ по формуле (13) для некоторых металлов приведены в табл. 1, из которой следует, что $l_К^{ид}$ примерно совпадает с параметрами кристаллических решеток (например, с параметром a). Полагая $l_К^0 = a$, из (13) получим выражение

$$\sigma = a\rho L/4, \qquad (14)$$

с помощью которого можно оценивать удельную поверхностную энергию на границе кристалл–расплав.

Из табл. 1 следует, что значения σ для ряда веществ, вычисленные по формуле (14), достаточно близки к экспериментальным [5].

Особый интерес представляет анализ величин $l_К$ и $A_К$ в зависимости от переохлаждений ΔT^-. Для этого выражение (12) нужно записать в виде

$$l_К = 4\sigma/\rho\tilde{L} = 4\sigma/\rho(L - (Zk_Б c_V/m_0)(T_L - \Delta T^-)). \qquad (15)$$

Как показывают расчеты, произведение $Zc_V \approx 1$. Например, для висмута при $Z = 7.29$ и $c_V = 0.14$ получаем $Zc_V \approx 1$, поскольку относительная концентрация вакансий, равная 0.14, означает отсутствие всего одного атома в элементарной ячейке (т.е. одна вакансия на ячейку). Аналогичные результаты получаются и для других металлов. Это позволяет упростить формулу (15) и представить ее в виде

$$l_К = 4\sigma/\rho(L - (k_Б/m_0)(T_L - \Delta T^-))$$

либо $l_К = 4\sigma/\rho(L - (R/M)(T_L - \Delta T^-))$, где $R = 8.31$ Дж/(моль К), M – молярная масса.

Найдя величину $l_К$ и подставив в выражение (5), находим работу образования зародыша $A_К = \Delta G_V$.

Таблица 1. Значения параметров решетки a, размеров $l_К^0$ при 0 К, критических размеров $l_К^{ид}$, рассчитанных по (2), работ $A_К^{ид}$ их образования, полученных по (3), и межфазной поверхностной энергии σ

Элемент	a, нм	$l_К^0$, нм	$l_К^{ид}$, нм	$A_К^{ид}$, 10^8 эВ	σ, Дж/м^2	$\sigma_{эксп}$, Дж/м^2
	[10]	при 0 К	при T_L	при T_L		[5]
Al	0.4050	0.3758	813.34	653.02	0.1005	0.0930
Cu	0.3615	0.3300	1004.95	37.91	0.1806	0.1770
Ga	0.4526	0.4731	277.45	0.02	0.0535	0.0559
Ag	0.4086	0.4607	1279.73	3.98	0.1054	0.1260
Sn	0.5830	0.3952	573.82	0.15	0.0624	0.0545
Sb	0.4500	0.3720	697.93	6.95	0.1950	0.1010
Pb	0.4950	0.5180	640.22	0.13	0.0320	0.0333
Bi	0.4750	0.3956	431.53	0.09	0.0653	0.0544

Таблица 2. Расчетные значения $l_К$ и $A_К$ для зародышей с вакансиями

Элемент	ΔT^-, К							
	0		20		40		60	
	$l_К$, нм	$A_К$, эВ	$l_К$, нм	$A_К$, эВ	$l_К$, нм	$A_К$, эВ	$l_К$, нм	$A_К$, эВ
Al	0.43592	0.23872	0.43591	0.23871	0.43591	0.23870	0.43589	0.23869
Cu	0.37057	0.03798	0.37056	0.03798	0.37056	0.03798	0.37056	0.03798
Ga	0.45819	0.01837	0.45818	0.01837	0.45817	0.01837	0.45815	0.01837
Ag	0.79061	0.12306	0.79060	0.12306	0.79059	0.12305	0.79058	0.12305
Sn	0.56845	0.02979	0.56844	0.02979	0.56842	0.02979	0.56841	0.02978
Sb	0.38634	0.23321	0.38634	0.23321	0.38633	0.23321	0.38633	0.23320
Pb	0.53354	0.44478	0.53352	0.44475	0.53350	0.44472	0.53348	0.44469
Bi	0.39606	0.24509	0.39605	0.24509	0.39605	0.24508	0.39604	0.24507

Расчеты по формулам показывают, что величины $l_К$ и $A_К$ являются слабозависящими функциями от ΔT^- (табл. 2) в отличие от $l_К^{ид}$ и $A_К^{ид}$, полученных из уравнений (2) и (3).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. С учетом конфигурационной и колебательной составляющих энтропии фазового превращения первого рода, связанных с наличием вакансий в кристаллах, получены формулы для расчета удельной теплоты плавления реального зародыша с вакансиями. Отмечается уменьшение удельной теплоты плавления в зависимости от роста концентрации вакансий.

2. На основании анализа энергии Гиббса выведены соответствующие выражения для расчета критических размеров зародышей кристаллов с вакансиями и работы образования подобных зародышей. Показана слабая зависимость данных параметров от переохлаждения жидкой фазы. Установлено, что критические размеры зародышей соизмеримы с параметрами решеток кристаллов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Валов П.М., Лейман В.И.* Стадия формирования и роста зародышей фазы CuCl в стекле // Физика твердого тела. 2005. Т. 47. Вып. 11. С. 2060.
2. *Сычева Г.А.* Определение размеров критического зародыша кристаллов в литиево и натриевосиликатных стеклах // Физика и химия стекла. 2015. Т. 41. № 3. С. 405.
3. *Львов П.Е., Крестина Н.С.* Моделирование роста кристаллов в сплавах на основе системы железо—медь на основе термического отжига // Изв. Самарск. науч. центра РАН. 2012. Т. 14. № 4(4). С. 1136.
4. *Фольмер М.* Кинетика образования новой фазы. М.: Наука, 1986. 206 с.
5. *Чалмерс Б.* Теория затвердевания. М.: Металлургия, 1968. 288 с.
6. *Штремель М.А.* Прочность сплавов. Дефекты решетки. М.: Металлургия, 1982. 278 с.
7. *Новиков И.И., Розин К.М.* Кристаллография и дефекты кристаллической решетки. М.: Металлургия, 1990. 336 с.
8. *Регель А.Р., Глазов В.М.* Периодический закон и физические свойства электронных расплавов. М.: Наука, 1978. 306 с.
9. *Татаринова Л.И.* Структура твердых аморфных и жидких веществ. М.: Наука, 1983. 150 с.
10. Свойства элементов. Спр. / Под ред. Дрица М.Е. М.: Металлургия, 1985. 672 с.

ТЕМАТИЧЕСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ ТОМА 58, 2020 г.

Теплофизические свойства веществ

Тепломассообмен и физическая газодинамика

Методы экспериментальных исследований и измерений

Новая энергетика

Обзоры

Краткие сообщения

В мире теплофизики