Влияние возбуждения электронным ударом на процесс кластеризации

© Л.В. Ярков,[1,2] Е.А. Бондарь,[1,2] Ю.Е. Горбачев[1]

[1]Новосибирский государственный университет,
630090 Новосибирск, Россия
[2]Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН,
630090 Новосибирск, Россия
e-mail: l.yarkov@g.nsu.ru

Поступило в Редакцию 5 мая 2026 г.
В окончательной редакции 23 июня 2026 г.
Принято к публикации 23 октября 2026 г.

Предложена численная модель для оценки влияния электронно-ударного возбуждения на кластеризацию аргона в сильно недорасширенных струях. С помощью предложенной модели исследовано влияние возбуждения мономеров электронами на процесс роста кластеров.

Ключевые слова: кластеризация, электронно-ударное возбуждение, уравнения Навье–Стокса.

DOI: 10.61011/JTF.2026.12.64061.273-26

Введение

Конденсация в звуковых/сверхзвуковых струях и соплах является одним из основных методов получения кластеров [1–3]. Один из возможных способов управления кластеризацией — стимулирование электронным ударом — был предложен в [4]. В настоящей работе представлены результаты численного моделирования этого эффекта в условиях аналогичных получаемым на газодинамическом вакуумном стенде ЛЭМПУС-2 отдела прикладной физики ФФ НГУ [5].

Рассматривается осесимметричное истечение аргона из форкамеры в камеру расширения через коническое сопло. В форкамере поддерживаются постоянные давление торможения P_0 и температура торможения T_0, рассматриваются такие давления и температуры, при которых образуются только малые кластеры (параметр Хагены $\Gamma^* < 1000$, [6]). Атомы аргона в окрестности среза сопла возбуждаются с электронами. Концентрация электронов вблизи среза сопла n_e. Предполагалось, что атомы аргона и кластеры движутся в струе с общей среднемассовой скоростью $\mathbf{U}$. Также считалось, что в струе не нарушается локальное термодинамическое равновесие. В рамках этих предположений поле течения описывается уравнениями Навье–Стокса для плотности ρ, скорости $\mathbf{U}$, температуры T и уравнениями переноса для локальной массовой доли компонента Y_g. Численное моделирование выполнено с помощью программного комплекса ANSYS Fluent.

1. Математическая модель

Газ рассматривается как смесь идеальных газов — мономеров аргона и кластеров. Каждый компонент смеси считается отдельным сортом с собственной массой m_g и газокинетическим диаметром d_g, где g — число мономеров в кластере (или размер кластера). Масса кластера равна $m_g = g m_{\mathrm{Ar}}$, где m_{Ar} — атомная масса аргона. Коэффициенты вязкости η_g и коэффициент теплопроводности κ_g компонентов определяются согласно кинетической теории газов в приближении твердых сфер:

$$\eta_g = \frac{5}{16 d_g^2}\sqrt{\frac{m_g k_B T}{\pi}}, \quad \kappa_g = \frac{75 k_B}{64 d_g^2}\sqrt{\frac{k_B T}{\pi m_g}}, \qquad (1)$$

где k_B — постоянная Больцмана. Давление компонента P_g вычисляется с помощью уравнения состояния идеального газа, а полное давление P — согласно закону Дальтона:

$$P_g = \frac{Y_g}{M_g}\rho R T, \quad P = \sum_g P_g, \qquad (2)$$

где ρ — суммарная плотность, R — газовая постоянная, M_g — молярная масса компонента. Удельная теплоемкость при постоянном давлении $C_{P,g}$ определяется согласно теореме о равнораспределении энергии по степеням свободы в соответствии с количеством степеней свободы кластера данного размера. Энтальпия компонента h_g и полная энтальпия H вычисляются соответственно как

$$h_g = C_{P,g}(T - T_0), \quad H = \sum_g Y_g h_g, \qquad (3)$$

где T_0 — референсная температура. Энергия диссоциации ε_g, равная энергии, необходимой для испарения одного атома с поверхности кластера, аппроксимировалась с помощью выражения

$$\varepsilon_g / k_B = a + \frac{2b}{3}(g-1)^{-1/3} + \frac{c}{3}(g-1)^{-2/3}, \qquad (4)$$

где $a = 947.4\,\mathrm{K}$, $b = -1518\,\mathrm{K}$, $c = 624\,\mathrm{K}$ согласно [4].

Поскольку в рассматриваемых условиях концентрация кластеров остается низкой по сравнению с концентрацией мономеров, среднемассовая скорость газа $\mathbf{U}$ практически совпадает со скоростью мономеров $\mathbf{U}_1$. Из-за того что кластеры в подавляющем большинстве соударяются с мономерами, скорость кластеров $\mathbf{U}_g$ выравнивается со скоростью мономеров, так что $\mathbf{U}_g \approx \mathbf{U}_1$, и, следовательно, $\mathbf{U}_g \approx \mathbf{U}$. Справедливость такой гипотезы для данных условий подтверждена в работе [3]. Из закона сохранения массы следует уравнение неразрывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0. \tag{5}$$

Уравнение для закона сохранения импульса

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla)\mathbf{U} \right) = -\nabla P + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \tag{6}$$

где τ — тензор вязких напряжений. Уравнение энергии

$$\frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} H) = \nabla \cdot (\kappa \nabla T + \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{U}) + Q_h,$$

$$Q_h = \sum_g \frac{\varepsilon_g}{m_g} R_g, \tag{7}$$

E — энергия на единицу массы, Q_h — объемный источник тепла за счет реакций. Локальная массовая доля Y_g компонента смеси подчиняется уравнению

$$\frac{\partial (\rho Y_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_g \mathbf{U}) = R_g + S_g, \quad \sum_g Y_g = 1, \tag{8}$$

где R_g — скорость образования компонента за счет кластеризации, S_g — источник. Поскольку в сопле и в струе перенос массы осуществляется в основном за счет конвекции, процессы диффузии не рассматривались.

Так как моделирование динамики электронов существенно усложнило бы численное решение, в данном подходе влияние электронного возбуждения оценивается с помощью введения источника возбужденных атомов аргона S_{Ar} в фиксированном объеме расчетной области V_0:

$$S_{\mathrm{Ar}^*} = -S_{\mathrm{Ar}} = \begin{cases} K_{el} n_e \rho_1, & \mathbf{r} \in V_0 \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}, \tag{9}$$

где n_e — концентрация электронов, ρ_1 — плотность мономеров в основном состоянии, K^{el} — эффективный коэффициент скорости возбуждения, который, согласно [4], равен

$$K_{el} = \sqrt{\frac{2E_e}{m_e}}\, \sigma^{el}_{1r_0 \to 1r_*}, \tag{10}$$

где m_e — масса электрона, E_e — энергия электрона, $\sigma^{el}_{1r_0 \to 1r_*}$ — сечение возбуждения электронным ударом. Для кластеров больших размеров ($g > 1$) источник S_g тождественно равен нулю.

2. Модель роста и распада кластеров

Образование димеров происходит в тройных столкновениях:

$$\mathrm{Ar} + \mathrm{Ar} + \mathrm{Ar} \underset{K_2^-}{\overset{K_2^+}{\longleftrightarrow}} \mathrm{Ar}_2 + \mathrm{Ar}, \tag{11}$$

где K_2^+ — константа скорости образования димеров, а K_2^- — константа скорости диссоциации. Константы скоростей образования и диссоциации димеров определяются выражениями [4]:

$$K_2^+ = 2\pi^2 d^2_{2,1r_0} d^3_{1r_0,1r_0} \sqrt{\frac{3k_B T}{m_{Ar}}}, \quad K_2^- = K^e_{c2} K_2^+,$$

$$K^e_{c2} = A_2 T \exp\left(-\frac{\varepsilon_2}{k_B T} \right), \tag{12}$$

где $d_{1r0,1r0} = 2r_0 + l_1$, $r_0 = 0.082316\,\mathrm{nm}$, $l_1 = 1.8$, $d_{2,1r0} = r_c 2^{1/3} + r_{c0} + r_0$, $r_{c0} = 0.34$, $r_c = 0.23$, K^e_{c2} аппроксимирована в форме закона Аррениуса, $\varepsilon_2/k_B = 147\,\mathrm{K}$, $A_2 = \exp(60.389)\,\mathrm{m}^{-3}$.

В дополнение к реакции (11) моделируются реакции образования димеров с участием одного или нескольких электронно-возбужденных мономеров Ar^*:

$$\mathrm{Ar}^* + \mathrm{Ar} + \mathrm{Ar} \underset{K_{2.1}^-}{\overset{K_{2.1}^+}{\longleftrightarrow}} \mathrm{Ar}_2 + \mathrm{Ar},$$

$$\mathrm{Ar}^* + \mathrm{Ar}^* + \mathrm{Ar} \xrightarrow{K_{2.2}^+} \mathrm{Ar}_2 + \mathrm{Ar},$$

$$\mathrm{Ar}^* + \mathrm{Ar}^* + \mathrm{Ar}^* \xrightarrow{K_{2.3}^+} \mathrm{Ar}_2 + \mathrm{Ar}. \tag{13}$$

Для этих реакций константы скоростей прямых процессов получены из того же механизма, что и для мономеров в основном состоянии [4]:

$$K^+_{2,1} = \frac{2\pi^2}{3} s_r \left(d^2_{2,1r_0} d^3_{1r_0,1r_0} + 2 d^2_{2,1r_*} d^3_{1r_0,1r_0} \right) \sqrt{\frac{3k_B T}{m_{\mathrm{Ar}}}}, \tag{14}$$

$$K^+_{2,2} = \frac{2\pi^2}{3} s_r \left(d^2_{2,1r_0} \frac{s_r + 1}{2} d^3_{1r_*,1r_*} + 2 s_r d^2_{2,1r_*} d^3_{1r_0,1r_*} \right) \sqrt{\frac{3k_B T}{m_{\mathrm{Ar}}}}, \tag{15}$$

$$K^+_{2,3} = \pi^2 s_r^2 (s_r + 1) d^2_{2,1r_*} d^3_{1r_*,1r_*} \sqrt{\frac{3k_B T}{m_{\mathrm{Ar}}}}, \tag{16}$$

где фактор вырождения $s_r = 2$ учитывается для столкновений с возбужденными атомами, $d_{1r0,1r_*} = r_0 + r_* + l_1$, $d_{1r_*,1r_*} = 2r_* + l_1$, $d_{2,1r_*} = r_c 2^{1/3} + r_* + r_{c0}$.

Соответствующие скорости прямых реакций (11) и (13) в уравнении (8):

$$R_2^+ = m_2 K_2^+ n_1^3, \quad R^+_{2,1} = m_2 K^+_{2,1} n_* n_1^2,$$

$$R^+_{2,2} = m_2 K^+_{2,2} n_1 n_*^2, \quad R^+_{2,3} = m_2 K^+_{2,3} n_*^3, \tag{17}$$

где n_1 — числовая плотность мономеров в основном состоянии, n_* — плотность мономеров в возбужденном

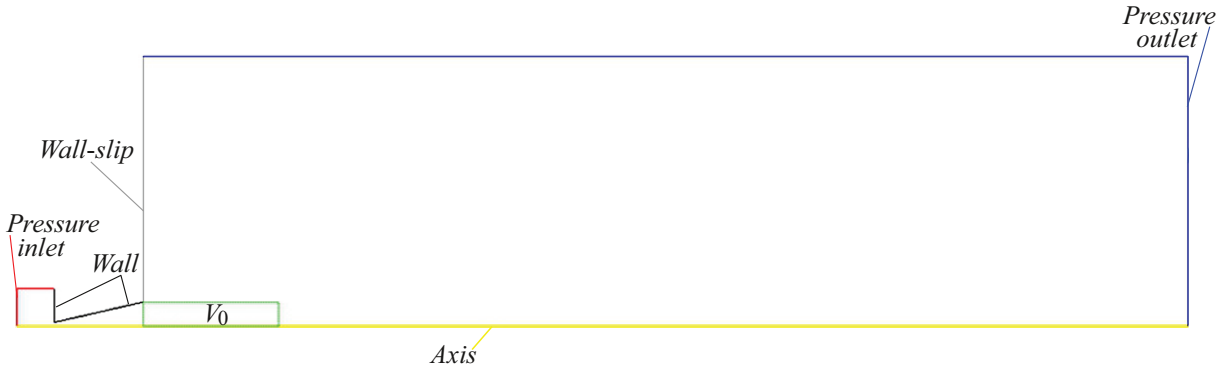


Рис. 1. Расчетная область.

состоянии. Рост и испарение кластеров размеров $g \geq 3$ протекает через прилипание мономеров к кластерам и прилипание возбужденных мономеров к кластерам:

$$\mathrm{Ar}_g + \mathrm{Ar} \underset{K^-_{g.1}}{\overset{K^+_{g.1}}{\longleftrightarrow}} \mathrm{Ar}_{g+1},$$

$$\mathrm{Ar}_g + \mathrm{Ar}^* \xrightarrow{K^+_{g.*}} \mathrm{Ar}_{g+1}. \qquad (18)$$

Соответствующие коэффициенты скорости прямых реакций:

$$K^+_{g,1} = \pi \left(r_c g^{1/3} + r_0 + r_{c0}\right) \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi \mu_{g,1}}},$$

$$K^+_{g,1} = s_r \pi \left(r_c g^{1/3} + r_* + r_{c0}\right) \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi \mu_{g,1}}}, \qquad (19)$$

где $\mu_{g,1} = m_{\mathrm{Ar}} m_g / m_{g+1}$, скорости прямых реакций равны

$$R^+_{g+1,1} = m_g K^+_{g,1} n_1 n_g, \quad R^+_{g+1,*} = m_g K^+_{g,*} n_1 n_g, \qquad (20)$$

где n_{g-1} — числовая плотность кластеров размера $g-1$. Коэффициент скорости испарения K^-_g находится с помощью константы равновесия реакции (18):

$$K^-_g = K^e_{cg} K^+_{g,1},$$

$$K^e_{cg} = K^e_{c2} \exp\left(\frac{2b(g-1)^{-1/3} + c(g-1)^{-2/3}}{3T}\right). \qquad (21)$$

Соответствующая скорость реакции равняется

$$R^-_g = m_g K^-_g n_g. \qquad (22)$$

3. Численный метод

Численное решение системы уравнений (5)–(8), дополненной уравнениями состояния (2) и (3), выполнялось в программе ANSYS Fluent. Задача рассматривалась в осесимметричной постановке для снижения вычислительных затрат. Использовался неявный решатель на основе плотности. Конвективные потоки вычислялись с помощью метода AUSM [7]. Для пространственной дискретизации потоков использовалась противопоточная схема второго порядка точности. При данных условиях течение характеризуется низким числом Рэйнольдса, что свидетельствует о существенном влиянии вязких сил, поэтому течение считается ламинарным.

Расчеты выполнялись в расчетной области, которая включает форкамеру, сверхзвуковое сопло (диаметр критического сечения $d_* = 0.5\,\mathrm{mm}$, длина сопла $L = 6.0\,\mathrm{mm}$, диаметр выходного сечения $d_a = 3.24\,\mathrm{mm}$) и камеру расширения (рис. 1). Длина расчетной области вниз по потоку от среза сопла вдоль оси потока составляет 70 mm, а протяженность в радиальном направлении от оси симметрии до границы — 18 mm. Объем, длиной 10 mm вниз по потоку, обозначенный на рис. 1, представляет собой область источника возбужденных атомов, источниковый член в этом объеме задается уравнением (9).

Граничные условия задаются следующим образом. На входной границе задаются полное давление P_{in} и полная температура T_{in}. Поскольку число Маха на входе много меньше единицы ($M \ll 1$), статическое давление P_0 практически равно полному давлению P_{in}. Выход рассматривается как граница с заданным статическим давлением P_h, если поток локально на границе становится сверхзвуковым, статическое давление экстраполируется из внутренней области. В случае обратного потока полная температура T_h равняется 300 K. На стенках сопла ставятся граничные условия прилипания и постоянной температуры $T_0 = 300\,\mathrm{K}$, в то время как на стенках камеры расширения задаются условия проскальзывания и скачка температуры для учета эффектов разреженности. Решение считалось сошедшимся, когда дисбаланс суммарного массового расхода по границе расчетной области становится менее 0.1 % от входного массового расхода.

4. Результаты

Были рассмотрены два набора граничных условий см. таблицу. Расчеты выполнены для четырех концентрацией электронов в области V_0: $n_e = 0,\ 10^{11},$

Рабочие параметры для двух моделируемых случаев

Параметр	1	2
P_{in}, kPa	10	20
T_{in}, K	303	303
P_h, Pa	0.133	0.2
T_h, K	300	300

10^{12} и $10^{14}\,\mathrm{m}^{-3}$, выбранных на основании оценки $n_e = 2 \cdot 10^{11}\,\mathrm{m}^{-3}$, определенной по величинам тока, ускоряющего напряжения и поперечного сечения пучка у среза сопла на стенде ЛЭМПУС-2.

На рис. 2 представлены контуры плотности газа для давлений на входе 10 и 20 kPa. В обоих случаях формируется сильно недорасширенная струя. При давлении 10 kPa струи имеет небольшую протяженность. Плотность газа быстро уменьшается вниз по потоку. При давлении 20 kPa ядро струи простирается на большее расстояние вдоль оси.

На рис. 3 показаны осевые профили суммарной мольной доли кластеров, рассчитанные для различных концентраций электронов. При увеличении числовой плотности электронов до $10^{12}\,\mathrm{m}^{-3}$ доля кластеров заметно увеличивается, а при $n_e = 10^{14}\,\mathrm{m}^{-3}$ рост становится еще более выраженным. Пороговая концентрация электронов, при которой возбуждение начинает заметно влиять на кластеризацию, составляет около $10^{12}\,\mathrm{m}^{-3}$.

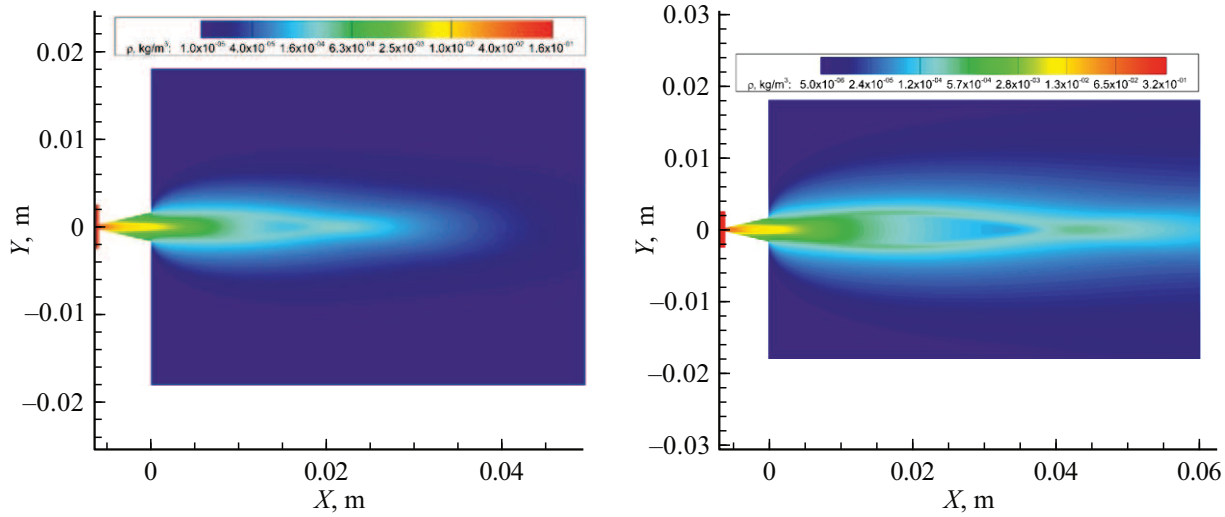


Рис. 2. Распределение плотности аргона для случая 1 (10 kPa) и случая 2 (20 kPa).

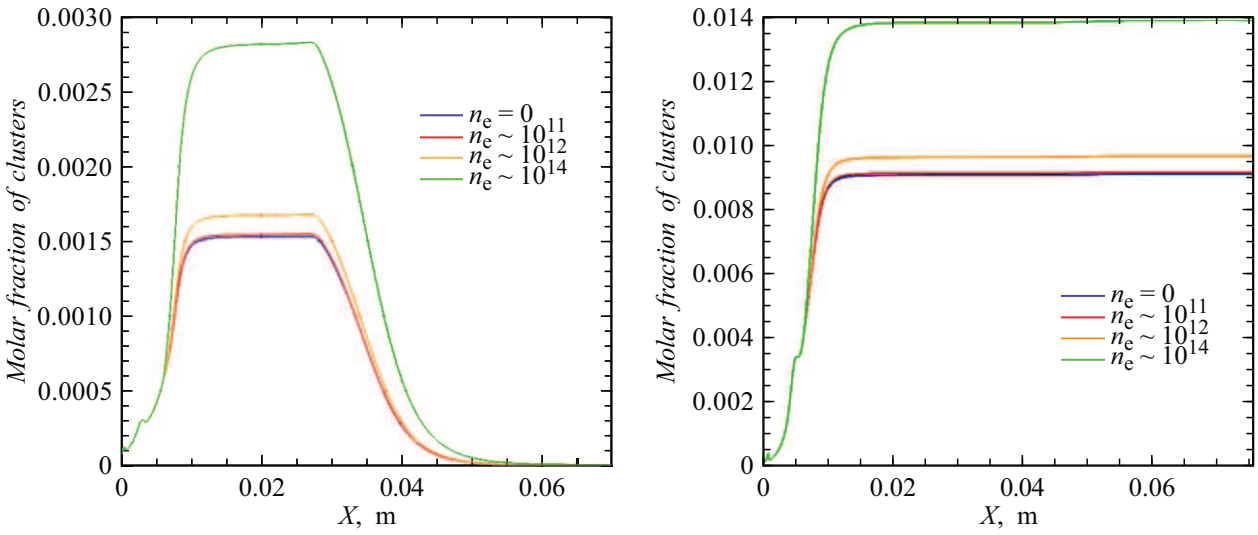


Рис. 3. Мольная доля кластеров вдоль оси (разные концентрации электронов).

Заключение

Разработана численная модель для описания кластеризации в сильно недорасширенной сверхзвуковой струе аргона с учетом возбуждения атомов электронным ударом. Возбуждение электронным ударом дополнительно увеличивает мольную долю кластеров за счет появления дополнительных каналов роста. Этот эффект остается незначительным при концентрациях электронов $n_e \sim 10^{11}\,\mathrm{m}^{-3}$ и становится существенным при $n_e \sim 10^{14}\,\mathrm{m}^{-3}$. В связи с тем, что в представленной модели использован ряд упрощающих предположений, ее следует рассматривать как первое приближение для описания рассматриваемого явления. Дальнейшие исследования авторов будут направлены на уточнение модели.

Финансирование работы

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект 22-11-00080-II, https://rscf.ru/en/project/22-11-00080/.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] A.E. Ieshkin, A.B. Tolstoguzov, N.G. Korobeishchikov, V.O. Pelenovich, V.S. Chernysh. Phys. Usp., **61**, 677 (2022). DOI: 10.3390/ma16134876
[2] A.V. Bulgakov, N.Y. Bykov, A.I. Safonov, Y.G. Shukhov, S. Starinskiy. Materials, **16**, 4876 (2023). DOI: 10.3390/ma16134876
[3] N.Y. Bykov, S.A. Fyodorov, Yu.E. Gorbachev. Phys. Fluids, **36**, 087134 (2024). DOI: 10.1063/5.0222569
[4] Yu.E. Gorbachev, D.V. Leshchev. Phys. Fluids, **37**, 103352 (2025). DOI: 10.1063/5.0299655
[5] A.E. Zarvin, V.V. Kalyada, V.Zh. Madirbaev, N.G. Korobeishchikov, M.D. Khodakov, A.S. Yaskin. IEEE Transactions Plasma Sci., **45**, 819 (2017). DOI: 10.1109/TPS.2017.2682901
[6] O.F. Hagena. Rev. Sci. Instrum., **63** (4), 2374 (1992). DOI: 10.1063/1.1142933
[7] M.-S. Liou. J. Comput. Phys., **129** (2), 364 (1996). DOI: 10.1006/jcph.1996.0256