

ВРЕМЯ ВРАЩАТЕЛЬНОЙ РЕЛАКСАЦИИ И КОЭФФИЦИЕНТЫ ПЕРЕНОСА В ДВУХАТОМНОМ ГАЗЕ

И. В. Лебедь, В. В. Рябов

(Жуковский)

В настоящее время широко используется два независимых определения времени релаксации. В первом случае общее выражение для температурной зависимости времени релаксации $\tau_{R1}(T)$ получается путем решения в рамках итерационного метода Чепмена — Энскога уравнения Больцмана для газа частиц, обладающих внутренними степенями свободы [1]. Во втором случае время релаксации $\tau_{R2}(T)$ отыскивается непосредственно из релаксационного уравнения путем вычисления скорости приращения внутренней энергии первоначально внутренне не возбужденных молекул [2].

При классическом описании вращательной релаксации газа гомоядерных двухатомных молекул необходимо задаться какой-либо моделью межмолекулярного взаимодействия, позволяющей рассчитать перераспределение вращательной и поступательной энергии при столкновении. Основным недостатком моделей шероховатых сфер, нагруженных сфер, сфероцилиндров, эллипсоидов заключается в замене реального межмолекулярного потенциала взаимодействия потенциалом твердых остовов различной формы. В результате рассчитанное с помощью этих моделей среднее число столкновений, необходимое для установления в системе равновесия по вращательным степеням свободы $Z_{R1}(T) = \tau_{R1}/\tau$, где τ — время поступательной релаксации, окажется независимым от температуры, что противоречит данным эксперимента [3].

В рамках модели Паркера [4] потенциал взаимодействия молекул представляется в виде суммы экспоненциального притяжения между центрами масс и экспоненциального отталкивания между центрами сил, расположенными на межъядерной оси на расстоянии $d^* < d$ друг от друга, где d — межъядерное расстояние. Разложение короткодействующей части потенциала в ряд Фурье приводило к общепринятому виду разложения по степеням косинусов углов между межатомными и межмолекулярной осями. Сохранение в этом разложении только двух первых членов оправдывалось малостью параметра анизотропии $\epsilon = 2I_2(y)/I_0(y)$, где $y = \alpha d^*/2$, α — обратный радиус действия межмолекулярных сил, I_0 и I_2 — модифицированные функции Бесселя. Рассчитанная в [4] и уточненная в [5] величина $Z_{R2}(T) = \tau_{R2}/\tau$, отвечающая плоскому столкновению первоначально не возбужденных ротаторов, монотонно росла с ростом температуры за счет ямы потенциала. Влияние потенциальной ямы на $Z_{R2}(T)$ в области температур, в десятки раз превосходящих ее глубину, объясняется в [6] приближенным характером оценки интегралов в [4].

Задача о перераспределении поступательной и вращательной энергии решена в [6] для модельного потенциала Паркера с учетом начального вращательного возбуждения сталкивающихся в плоскости молекул. В [6] влияние дальнедействующей части потенциала проявляется только в дополнительном ускорении партнеров в области взаимодействия, рассчитанная температурная зависимость крайне слаба.

Сравнение двумерного и трехмерного расчетов проводилось в [7, 8] путем численного интегрирования уравнений движения с потенциалом Паркера. Показано, что в пространственном случае $Z_{R1}(T)$ в зависимости от параметров потенциала в 1,5—3 раза больше, чем в плоском случае, причем отношение времен релаксации не зависит от температуры [7]. Таким образом, переход от плоского к пространственному случаю может быть осуществлен либо введением дополнительного стерического фактора, либо соответствующим подбором подгоночного параметра теории d^* .

Потенциал попарного экспоненциального отталкивания отдельных атомов молекул использовался в [9] в качестве межмолекулярного потенциала. В отличие от потенциала Паркера [4] при разложении потенциала [9] в ряд по степеням косинусов углов между межатомными и межмолекулярной осями из-за большого параметра анизотропии уже нельзя ограничиваться двумя первыми членами разложения. Проведенный в [9] численный расчет обнаружил, несмотря на пренебрежение дальнедействующей частью потенциала, монотонный рост $Z_{R1}(T)$ с ростом температуры. Расхождение результатов работ [4] и [9] объясняется в [9] используемыми в [4] при решении системы уравнений движения предположениями. Однако эти расхождения могут быть обусловлены различием потенциалов взаимодействия.

Учет адиабатического характера обмена энергией между высоковозбужденными вращательными состояниями молекул проведен в [5], где время вращательной релаксации определялось путем решения диффузионного уравнения для случая прохождения ультразвука через газ. При расчете коэффициента диффузии использовался модельный потенциал Паркера. Оказалось, что время вращательной релаксации зависит от частоты ультразвука, причем оно приблизительно в 2 раза превосходит $\tau_{R2}(T)$.

Классические выражения для коэффициентов сдвиговой вязкости и теплопроводности газа частиц, обладающих внутренними степенями свободы, получены в [10] путем решения классического варианта уравнения Больцмана методом Чепмена — Энского. Представленные в [10] соотношения имеют вид усредненных по параметрам сталкивающейся пары молекул функций передаваемой при столкновении с поступательных на вращательные степени свободы энергии $\Delta E'$ и угла рассеяния χ .

Расчет $\Delta E'$ и χ для случая столкновения жестких ротаторов может быть выполнен с помощью моделей шероховатых сфер, нагруженных сфер, сфероцилиндров и эллипсоидов. Однако сравнение рассчитанных на основе этих моделей коэффициентов сдвиговой вязкости и теплопроводности с экспериментом не дает особенно хороших результатов [4].

В [8] $\Delta E'$ и χ получены путем численного интегрирования двумерных и трехмерных классических уравнений движения с модельным потенциалом Паркера. Коэффициенты сдвиговой вязкости и теплопроводности представлены в виде десятикратных интегралов и рассчитываются методом Монте-Карло. Ввиду громоздкости подобного расчета представленные результаты отвечают только трем значениям температуры: $T = 300, 600$ и 900 К. Результаты расчета удовлетворительно согласуются с экспериментом.

Мэзон и Мончик [11], рассматривая отношение $\Delta E'$ к kT , где k — постоянная Больцмана, в качестве возмущения, упростили соотношения [10]. Приведенные в [11] приближенные соотношения содержат в качестве параметров $\tau_{R1}(T)$ и коэффициент самодиффузии, которые могут быть получены без решения динамической задачи о столкновении частиц, обладающих внутренними степенями свободы. Соотношения [11] используются для расчета коэффициентов переноса вплоть до настоящего времени.

В данной работе расчет $Z_{R1}T$ и $Z_{R2}(T)$, а также коэффициентов сдвиговой вязкости и теплопроводности проводится в диапазоне температур $300-10\,000$ К для азота. В качестве потенциала взаимодействия молекул используется короткодействующая часть потенциала Паркера. Искажение выбранного потенциала дальнедействующими силами учитывается путем введения зависящего от температуры обратного радиуса действия. Предлагается использовать вместо $Z_{R2}(T)$ двухпараметрическую величину $Z_{R2}(T, T_R)$, которая, помимо температуры, зависит дополнительно от параметра T_R , характеризующего начальное распределение по вращательным уровням. Возможность введения двухпараметрической зависимости $Z_{R2}(T, T_R)$ обосновывается с помощью точного расчета, проведенного для параводорода в изотермическом случае. Рассчитанные в рамках метода Чепмена — Энского коэффициенты сдвиговой вязкости и теплопроводности сравниваются с величинами, получаемыми с помощью приближенных соотношений [11]. Проводится анализ чувствительности рассчитанных значений к параметрам потенциала взаимодействия.

1. Рассмотрим задачу о перераспределении поступательной и вращательной энергии при столкновении одинаковых гомоядерных молекул в фиксированной плоскости, являющейся одновременно плоскостью вращения каждой молекулы. Следуя Паркеру [4], представим потенциал взаимодействия в виде

$$(1.1) \quad V = C \exp(-\alpha r)(1 + \epsilon \cos 2\theta_1 + \epsilon \cos 2\theta_2),$$

где C — постоянная; r — межмолекулярное расстояние; θ_1 и θ_2 — углы между межмолекулярной и межатомными осями молекул.

Представленная в [4] система классических уравнений движения с потенциалом (1.1) решалась в рамках теории возмущений по ϵ . В нулевом приближении вращательное состояние молекул не меняется в результате столкновения. В узкой области действия межмолекулярного потенциала $1/\alpha$ слабо меняющаяся по r центробежная энергия $mv^2b^2/2r^2$ в соответствии с приближением эффективного волнового числа [12] заменяется на постоянную величину $mv^2b^2/2r_0^2$, где m — масса атома молекулы, b — прицельный параметр, v — скорость относительного движения невзаимодействующих партнеров, r_0 — параметр, принимающий значение в узком диапазоне $1/\alpha$ около точки поворота.

Принятые приближения позволяют в первом порядке теории возмущений по ϵ получить аналитические выражения для результирующих уг-

ловых скоростей молекул:

$$(1.2) \quad \varphi_i = -16\pi l_i \sin 2\psi_i / (\alpha^2 d^2 \operatorname{sh}^2 \kappa_i) \quad (i = 1, 2),$$

где $l_i = \sqrt{2p_i/d - qg/r_0}$; $\psi_i = \varphi_i - \arcsin q$; $\kappa_i = 2\pi l_i / (\alpha g \sqrt{1 - q^2 + 2D/g^2 kT})$; $q = b/r_0$; $g = (\sqrt{m/kT})v$; p_i и φ_i — начальные приведенные моменты вращения и начальные фазы, отсчитываемые от направления начальной скорости относительного движения молекул. Дополнительное ускорение в области взаимодействия за счет дальнедействующих сил учтено в (1.2) в соответствии с [12] путем замены $mv^2/2$ на $mv^2/2 + D$, где $D = 96,6\text{К}$ — глубина потенциальной ямы [13].

Выражения для приведенных переданных при столкновении с поступательных на вращательные степени свободы энергии $\Delta E = \frac{2}{mv^2} \Delta E'$, $\Delta E = \Delta E_1 + \Delta E_2$ и момента $\Delta M = \Delta M' / mvr_0$, $\Delta M = \Delta M_1 + \Delta M_2$ примут вид

$$(1.3) \quad \begin{aligned} \Delta E_i &= 128\pi^2 \varepsilon^2 l_i^2 \sin^2 2\psi_i / (\alpha^4 g^2 d^2 \operatorname{sh}^2 \kappa_i) - \\ &\quad - 16 \sqrt{2} \pi \varepsilon p_i l_i \sin 2\psi_i / (\alpha^2 g^2 d \operatorname{sh} \kappa_i), \\ \Delta M_i &= -8\pi \varepsilon l_i \sin 2\varphi_i / (\alpha^2 g r_0 \operatorname{sh} \kappa_i) \quad (i = 1, 2). \end{aligned}$$

Силы притяжения приводят к заметному отличию изотропной части модельного потенциала (1.1) от реального изотропного потенциала взаимодействия молекул азота $V_0(r)$ из [13] в области $r > 3,1096 \cdot 10^{-7}$ мм. Аппроксимируя в каждой точке поворота r_p короткодействующую ветвь $V_0(r)$ экспоненциальной функцией $C \exp(-\alpha r)$, находим значение параметра $\alpha(r_p) = -d \ln V_0(r) / dr|_{r_p}$. В том случае, когда функция распределения молекул по энергии относительного движения слабо отличается от максвелловской, каждая r_p , а следовательно, и $\alpha(r_p)$ могут быть отнесены к максимуму этой функции, локализованному около kT .

Графики зависимости $\alpha(T)$ и $\varepsilon(T)$, отвечающие $d^* = 0,62$, представлены на фиг. 1, а, б соответственно.

Приравняем параметр r_0 , принимающий значение в узком диапазоне $1/\alpha$, интегралу $\sqrt{\Omega^{(2,2)}}$, рассчитанному в [13] для точного потенциала $V_0(r)$. Такой выбор r_0 обеспечивает равенство рассчитанных в [13] коэффициентов переноса коэффициентам переноса газа твердых сфер радиуса $r_0/2$. Зависимости $r_0(T)$ и $r_p(T)$ представлены на фиг. 1, в.

Как известно, угол упругого рассеяния на короткодействующем потенциале может быть удовлетворительно аппроксимирован углом рассеяния твердых сфер [12]. Ввиду того, что вычисленные значения $\Delta E'$ значительно меньше kT , расчет угла рассеяния осуществляется в предположении, что перенос энергии с поступательных на вращательные степени свободы происходит мгновенно в точке r_0 .

В результате имеем

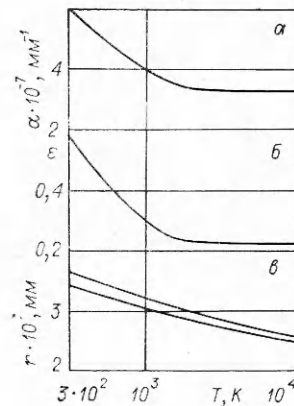
$$(1.4) \quad \chi = \beta - \gamma, \quad \gamma = \arcsin \left(\frac{\sin \beta - \Delta M}{\sqrt{1 - \Delta E}} \right),$$

где $\beta = \arcsin q$ — угол между вектором \mathbf{v} и вектором, проведенным из центра рассеяния в точку r_0 .

В τ -приближении процесс установления равновесия по вращательным степеням свободы описывается релаксационным уравнением, устанавливающим экспоненциальное приближение к равновесию по времени [2]:

$$(1.5) \quad d\varepsilon_R/dt = (\varepsilon_R^0 - \varepsilon_R) / \tau_R,$$

где ε_R — вращательная энергия, приходящаяся на одну молекулу, ε_R^0 — ее равновесное значение. Вообще говоря, (1.5) справедливо при ма-



Фиг. 1

лых отклонениях от равновесия $(\varepsilon_R^0 - \varepsilon_R)/\varepsilon_R^0 \ll 1$; $\tau_{R2}(T)$ определяется из (1.5) как отношение ε_R^0 к скорости приращения энергии первоначально не возбужденных ротаторов [2]. В рассматриваемом случае эта скорость может быть определена путем усреднения (1.3), в котором предварительно необходимо положить $p_1 = p_2 = 0$:

$$(1.6) \quad Z_{R2}(T) = \frac{4}{\pi\eta_0} p\tau_{R2}(T), \quad p\tau_{R2}(T) = \frac{5}{I} \left(\frac{\alpha^2 dr_0}{128\pi\varepsilon} \right)^2,$$

где p — давление газа; $I = \frac{2}{(2\pi mkT)^{1/2}} \int_0^{r_0} \int_0^\infty q^2 \frac{g^5}{8} \exp\left(-\frac{g^2}{2}\right) \left| \text{sh}^2 \kappa_0 b db dg \right|$;

$$\eta_0 = 5(2\pi mkT)^{1/2} / 16\pi r_0^2; \quad \kappa_0 = \kappa_1|_{p_1=0}.$$

Оценим влияние начального распределения по вращательным состояниям, которым пренебрегается при расчете $Z_{R2}(T)$ (1.6). Предположим, что в момент $t = 0$ это распределение отвечает больцмановскому с некоторой температурой $T_R \neq 0$. В этом случае время вращательной релаксации станет функцией не только T , но и T_R :

$$(1.7) \quad Z_{R2}(T, T_R) = \frac{4}{\pi\eta_0} p\tau_{R2}(T, T_R), \quad p\tau_{R2}(T, T_R) = \frac{5\pi}{64} \frac{(1 - T_R/T)}{I},$$

$$\tilde{I} = \frac{2}{\pi^2} \frac{1}{(2\pi mkT)^{1/2}} \int_0^{r_0} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_{-\infty}^{+\infty} \Delta \tilde{E} \exp\left(-\frac{g^2 + p_1^2 + p_2^2}{2}\right) b db \frac{g^5}{8} \times \\ \times dg d\varphi_1 d\varphi_2 dp_1 dp_2,$$

где в качестве $\Delta \tilde{E}$ должно быть использовано выражение (1.3), в котором p_i следует заменить на $(\sqrt{T_R/T})p_i$.

В случае незатрудненного обмена между поступательными и вращательными степенями свободы $\tau \leq \tau_{R1}(T) \ll \theta$, где θ — характерное время течения, ε_R^0 и ε_R различаются между собой на пропорциональную числу Кнудсена малую величину. Общее выражение для $Z_{R1}(T)$ отыскивается путем решения уравнения Больцмана методом Ченмена — Энского [1]:

$$(1.8) \quad Z_{R1}(T) = \frac{4}{\pi\eta_0} p\tau_{R1}(T),$$

$$1/p\tau_{R1}(T) = \frac{5}{3} \frac{2}{\pi^2 (2\pi mkT)^{1/2}} \int_0^{r_0} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_{-\infty}^{+\infty} \Delta E^2 \exp\left[-\frac{g^2 + p_1^2 + p_2^2}{2}\right] \times \\ \times b db \frac{g^7}{16} dg d\varphi_1 d\varphi_2 dp_1 dp_2.$$

При выводе (1.8) температура определялась по полной энергии молекул. Формула (1.8) множителем $5/3$ отличается от соответствующей величины, получаемой при определении температуры по кинетической энергии молекул [2].

Общие выражения для коэффициентов переноса, отвечающие случаю незатрудненного обмена между поступательными и вращательными степенями свободы, приведены в [8, 10]. В рассматриваемом случае эти выражения примут вид

$$(1.9) \quad \eta^{-1} = \frac{8}{5} \int \left(\sin^2 \chi - \frac{\Delta E^2}{2} \sin^2 \chi + \frac{\Delta E^2}{3} \right) \frac{g^2}{2} dw, \quad \eta_0^{-1} = \frac{16\pi r_0^2}{5(2\pi mkT)^{1/2}},$$

$$\lambda \left(1 - \frac{Y^2}{XZ} \right) = \frac{75}{16} \frac{k}{m} \frac{1}{X} + \frac{15}{4} \frac{k}{m} \frac{Y}{XZ} + \frac{3}{4} \frac{k}{m} \frac{1}{Y},$$

$$X = \frac{5}{2} \frac{1}{\eta} + \frac{5}{4} \frac{1}{p\tau_{R1}(T)}, \quad Y = \frac{3}{4} \frac{1}{p\tau_{R1}(T)},$$

$$Z = \frac{3}{2} \frac{1}{\rho D_0} + \int \left\{ \frac{3}{4} g^2 \Delta E^2 + (p_1^2 - p_2^2) [p_1^2 \cos \chi_0 - (p_1^2 + g^2 \Delta E_1) \sqrt{1 - \Delta E \cos \chi}] \right\} dw,$$

$$\frac{1}{\rho \nu_0} = \frac{8}{3} \int (1 - \cos \chi_0) dw, \quad \lambda_0 = \frac{15}{8} \frac{k}{m} \eta_0,$$

$$\int () dw = \frac{1}{\pi^2 (2\pi m k T)^{1/2}} \int_0^\infty \int_0^{r_0} \int_0^\pi \int_{-\infty}^{+\infty} () \exp \left[-\frac{g^2 + p_1^2 + p_2^2}{2} \right] \frac{g^5}{3} \times$$

$$\times dg db dd \varphi_1 d\varphi_2 dp_1 dp_2.$$

В (1.9) η и η_0 — коэффициенты сдвиговой вязкости, отвечающие вращательно неупругим и упругим столкновениям; λ и λ_0 — соответствующие значения коэффициента теплопроводности; ρ — плотность газа; D_0 — коэффициент самодиффузии упруго сталкивающихся молекул. В выражении для Z в явном виде выделен член $(3/2)\rho D_0$, отвечающий пространственному диффузионному переносу вращательной энергии, $\cos \chi_0 = -\cos \beta$.

Простейшей аппроксимацией, обычно используемой при расчете коэффициентов переноса, является

$$(1.10) \quad \lambda = \left(\frac{3}{4} \frac{k}{m} f_{tr} + \frac{1}{2} \frac{k}{m} f_{in} \right) \eta,$$

где $\eta = \eta_0$ [1]. Эйкен, используя элементарные представления о длине свободного пробега и учитывая корреляции между кинетической энергией молекулы и ее скоростью, получил следующие значения коэффициентов: $f_{tr}^e = 5/2$, $f_{in}^e = 1$ [1].

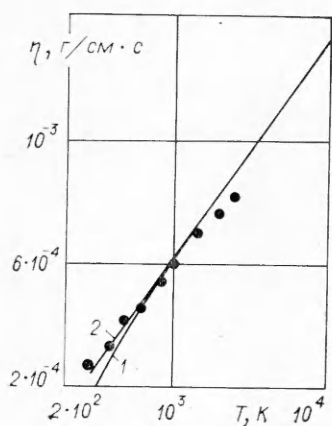
Мэзон и Мончик [11], анализируя соотношения (1.9), положили в первом приближении $\Delta E = 0$. Полученное в результате выражение для коэффициента теплопроводности совпало с (1.10), в котором, однако, $f_{tr}^1 = 5/2$, $f_{in}^1 = \rho D_0 / \eta$, причем $\eta = \eta_0$. Первое приближение метода [11] учитывает диффузионный перенос, но пренебрегает релаксацией вращательной энергии. Частичный учет релаксации проводился в следующем, втором приближении, в котором в выражении для Z , помимо $(3/2)\rho D_0$, сохраняется первый член суммы под интегралом. В результате выражения для коэффициентов f_{tr}^2 и f_{in}^2 из (1.10) имеют вид

$$f_{tr}^2 = \frac{5}{2} \left[1 - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{2}{5} \frac{\rho D_0}{\eta} \right) \frac{\eta}{p \tau_{R1}} \right], \quad f_{in}^2 = \frac{\rho D_0}{\eta} \left[1 + \frac{3}{4} \left(1 - \frac{2}{5} \frac{\rho D_0}{\eta} \right) \frac{\eta}{p \tau_{R1}} \right].$$

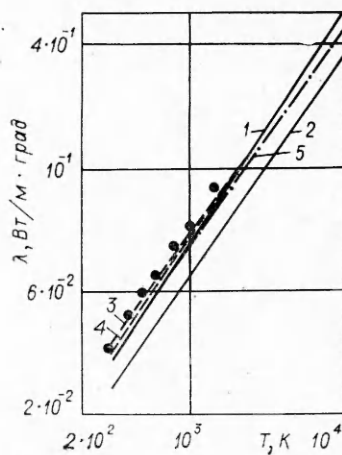
Во втором приближении $\sin^2 \chi$ аппроксимировался его значением, усредненным по единичной сфере и равным $2/3$; таким образом, $\eta = \eta_0$.

2. На фиг. 1 представлены используемые для расчета времен вращательной релаксации и коэффициентов переноса температурные зависимости $\alpha(T)$, $\varepsilon(T)$ и $r_0(T)$, отвечающие $d^* = 0,62$. Вычисление шестикратных интегралов осуществлялось в 200 точках исследуемого диапазона температур методом Монте-Карло с использованием 4000 испытаний в каждой точке. Гладкое восполнение полученных температурных зависимостей проводилось с помощью кусочно-кубических интерполяционных сплайнов дефекта 1 со сглаживанием [14]. Оцененная результирующая точность расчетов составляет 1,5%. У нижней границы температурного диапазона точность проведенного расчета несколько ниже, так как высшие порядки теории возмущений по ε внесут заметный вклад.

Кривыми 1 и 2 на фиг. 2 представлены η и η_0 соответственно, даваемые (1.9), точками — экспериментальные результаты [15]. Отклонение η и η_0 достигает нескольких процентов в области низких температур и перестает превышать погрешность расчета при $T > 1000$ К. Кривыми 1 и 2 на фиг. 3 представлены λ и λ_0 соответственно, даваемые (1.9). Штриховые кривые 3 и 4 отвечают соответственно первому и второму приближениям



Ф и г. 2



Ф и г. 3

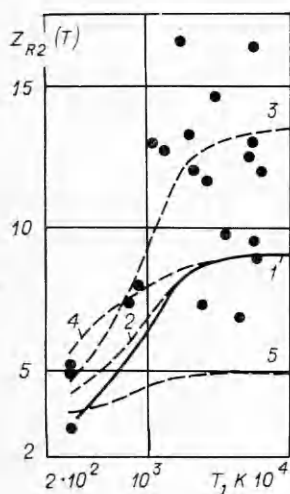
Мэзона и Мончика λ_1 (соотношение (1.10) с f_{ir}^1 и f_{in}^1) и λ_2 . Штрихпунктирная кривая 5 рассчитана в приближении Эйкена λ_e , точки — экспериментальные результаты [15]. Отклонение λ от λ_1 , отличающегося от λ_0 за счет учета диффузионного переноса вращательной энергии, составляет несколько процентов в области низких температур. Учет релаксации вращательной энергии в λ_2 улучшает согласие с точным расчетом. В области высоких температур $T > 1000$ К отличие λ от λ_1 и λ_2 не превышает погрешности расчета; λ превышает λ_e во всем исследуемом диапазоне температур.

Численный расчет показал, что отклонение η от η_0 , а также λ от λ_2 и λ_1 в области низких температур обязано своим происхождением исключительно различию угла рассеяния при вращательно неупругом соударении от угла упругого рассеяния χ_0 . Параметры потенциала D , α и d^* в разной степени влияют на величину этого отклонения. Варьирование D , ответственного за дополнительное ускорение партнеров в области взаимодействия, не приведет к изменению η , λ и λ_2 , превышающему пределы точности расчета. Увеличение параметров α и d^* уменьшает η , λ и λ_2 на несколько процентов.

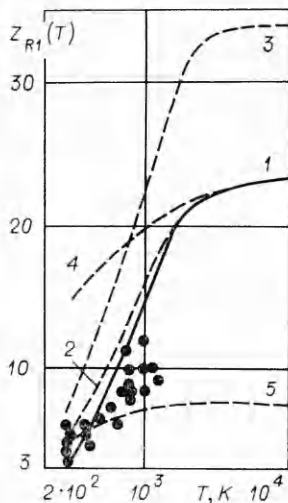
Выбранная в работе аппроксимация изотропной части потенциала взаимодействия молекул предопределила характер температурной зависимости η_0 и λ_0 , а следовательно, η и λ . Таким образом, устранение незначительного расхождения между теоретическими температурными зависимостями η и λ и экспериментом (см. фиг. 2, 3) может быть достигнуто прежде всего за счет выбора потенциала.

Расчет показал, что во всем исследуемом диапазоне температур $Z_{R1}(T)$ в 2—2,5 раза превосходит $Z_{R2}(T)$ независимо от параметров потенциала D , α , d^* . Это отличие является, по-видимому, результатом адиабатического характера обмена энергией между высоковозбужденными вращательными состояниями молекул. Величину $Z_{R1}(T)$ следует использовать для интерпретации экспериментальных данных по рассеянию и поглощению ультразвука, при этом влиянием частоты ультразвука на $Z_{R1}(T)$ пренебрегается [5]. Величину $Z_{R2}(T)$ следует использовать для интерпретации данных эксперимента в ударных трубах. При таком сопоставлении пренебрегаем влиянием начального распределения по вращательным уровням.

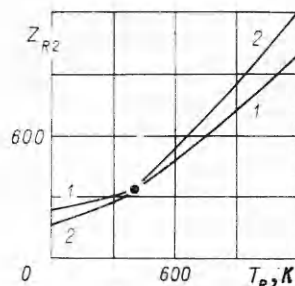
Отметим, что имеющиеся экспериментальные данные, как ультразвуковые, так и ударно-волновые, различаются между собой на 200—300%, что равняется приблизительно различию $Z_{R1}(T)$ от $Z_{R2}(T)$. Экспериментальный разброс значительно осложняет выбор подгоночного параметра теории d^* . Значение $d^* = 0,62$, по нашему мнению, наиболее удовлетворительно интерпретирует совокупность экспериментальных данных как в ударных трубах (фиг. 4), так и в ультразвуковых (фиг. 5); $d^* = 0,62$ является промежуточной величиной между обычно используемыми $d^* = 0,557$ [4] и $d^* = 0,66$ [6].



Фиг. 4



Фиг. 5



Фиг. 6

Кривые 1 на фиг. 4, 5 — результаты расчета по формулам (1.6) и (1.8) соответственно. Точками представлены экспериментальные результаты различных авторов в [5, 8]. Штриховые кривые 2 — результат расчета по формулам (1.6) и (1.8) для $D = 0$.

Таким образом, учет дополнительного ускорения за счет дальнодействующих сил незначительно уменьшает $Z_{R1}(T)$ и $Z_{R2}(T)$ в области низких температур. Параметры α , d^* наиболее сильно влияют на $Z_{R1}(T)$ и $Z_{R2}(T)$: уменьшение как α , так и d^* вызывает увеличение $Z_{R1}(T)$ и $Z_{R2}(T)$. Штриховые кривые 3 отвечают $d^* = 0,557$, 4 и 5 — постоянным значениям $\alpha = 3,35 \cdot 10^7$ и $5,32 \cdot 10^7 \text{ мм}^{-1}$ соответственно. Отметим, что при постоянном α как $Z_{R1}(T)$, так и $Z_{R2}(T)$ остаются приблизительно постоянными везде, за исключением низких температур, где учет дополнительного ускорения партнеров за счет дальнодействующих сил незначительно уменьшает их. Таким образом, в рамках описанной выше модели экспериментально наблюдаемое увеличение $Z_{R1}(T)$ и $Z_{R2}(T)$ с ростом температуры практически полностью обязано своим происхождением искажению экспоненциального отталкивания дальнодействующими силами, учитываемому с помощью температурной зависимости параметра α .

Величина $Z_{R2}(T, T_R)$, рассчитываемая по (1.7) при $T = 1000 \text{ К}$, уменьшается от 6,5 для $T_R = 0$ до 1,6 для $T_R = 800 \text{ К}$.

3. Для ответа на вопрос, какое из времен релаксации $\tau_{R2}(T)$ или $\tau'_{R2}(T, T_R)$ позволяет более точно описать приближение системы к равновесию, необходимо сравнить решения уравнения (1.5) с точным решением, полученным путем интегрирования кинетических уравнений для заселенностей вращательных состояний.

Система кинетических уравнений для заселенностей n_j отдельных вращательных уровней j решена нами для параводорода при постоянной температуре $T = 400 \text{ К}$. При расчете использовались константы скоростей вращательных переходов, рассчитанные в [16] в рамках метода эффективного потенциала, и $r_0^2 = 8,55 \cdot 10^{-14} \text{ мм}^2$ из [3]. Полученные на основе (1.5) $\tau_{R2}(T)$ и $\tau'_{R2}(T, T_R)$ сравнивались с точной величиной $\tau'_{R2}(T, T_R)$, определяемой соотношением

$$(3.1) \quad \varepsilon_R(\tau'_{R2}) = \varepsilon_R^0(1 - e^{-1}) + \varepsilon_R(0)e^{-1},$$

где $\varepsilon_R^0 = \sum B_j(j+1)n_j^0$; $\varepsilon_R(0) = \sum B_j(j+1)n_j(0)$; n_j^0 и $n_j(0)$ — Больцмановские заселенности j -го уровня с температурами T и T_R соответственно; B — вращательная постоянная.

Результаты расчета представлены на фиг. 6, $Z_{R2}(T, T_R)$ при $T = 400 \text{ К}$ дается кривой 1, результат точного расчета с использованием (3.1) представлен кривой 2. Точка $T_R = 0$ кривой 1 отвечает $Z_{R2}(T)$. Как и для исследованного выше случая вращательной релаксации азота,

налицо достаточно сильная зависимость времени релаксации от T_R , причем использование двухпараметрической величины заметно улучшит выполняемый по (1.5) приближенный расчет. Представленные результаты указывают на необходимость учета в рамках τ -приближения начального распределения по вращательным уровням.

Авторы благодарят Г. В. Дубровского, Е. Г. Колесниченко, С. А. Лосева, А. И. Осипова и С. Я. Уманского за обсуждение работы.

Поступила 16 VI 1982

ЛИТЕРАТУРА

1. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. М.: Мир, 1976.
2. Гордиец Б. Ф., Осипов А. И., Шелепин Л. А. Кинетические процессы в газах и молекулярных лазерах. М.: Наука, 1980.
3. Гиршфельдер Дж., Кергасс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: ИЛ, 1961.
4. Parker J. G. Rotational and vibrational relaxation in diatomic gases. — Phys Fluids, 1959, vol. 2, N 4.
5. Brau C. A., Jonkman R. H. Classical theory of rotational relaxation in diatomic gases. — J. Chem. Phys., 1970, vol. 52, N 2.
6. Nyeland C. Rotational relaxation of homonuclear diatomic molecules. — J. Chem. Phys., 1967, vol. 46, N 1.
7. Герасимов Г. Я. Пространственная модель вращательных переходов в двухатомном газе. — ТВТ, 1974, т. 12, № 5.
8. Lordi J. A., Mates R. E. Rotational relaxation in nonpolar diatomic gases. — Phys. Fluids, 1970, vol. 13, N 2.
9. Герасимов Г. Я., Макаров В. Н. К теории вращательной релаксации в двухатомном газе. — ПМТФ, 1975, № 1.
10. Tauxman N. Classical theory of transport phenomena in dilute polyatomic gases. — Phys. Rev., 1958, vol. 110, N 6.
11. Mason E. A., Monchick L. Heat conductivity of polyatomic and polar gases. — J. Chem. Phys., 1962, vol. 36, N 6.
12. Никитин Е. Е., Осипов А. И. Колебательная релаксация в газах. — В сб.: Итоги науки и техники, сер. Кинетика и катализ, 1977, т. 4.
13. Беляев Ю. Н., Полянский В. А., Ромашин И. В., Шапиро Е. Г. Ин-т механики МГУ, отчет № 1802, 1976.
14. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1977.
15. Варгафтик И. Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. М.: Наука, 1972.
16. Rabitz H., Lam S. H. Rotational energy relaxation in molecular hydrogen. — J. Chem. Phys., 1975, vol. 63, N 8.

УДК 531; 539.5; 621.316.5

ДИНАМИКА ИМПУЛЬСНОГО НАГРЕВА МЕТАЛЛА ТОКОМ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ВЗРЫВ ПРОВОДНИКОВ

В. Н. Доровский, А. М. Искольдский, Е. И. Роменский

(Новосибирск)

Исследования электрического взрыва носят в основном экспериментальный характер и ориентируются на решение конкретных практических задач. В частности, взрывающиеся проводники применяются в устройствах прерывания тока энергоемких индуктивных накопителей — существенных элементов некоторых крупных термоядерных проектов. Определенный интерес представляет электрический взрыв в связи с обсуждением и реализацией одной из схем так называемого инерционного термоядерного синтеза, в которой электрическая энергия емкостного накопителя передается схлопывающейся металлической оболочке без промежуточного преобразования в свет или энергичные частицы.

Моделирование процессов импульсного нагрева проводников током представляет интерес также в связи с экспериментальными закономерностями, интерпретируемыми как аномалии. А именно с теми, которые дают повод считать некоторые феноменологические характеристики среды зависящими не только от термодинамических переменных, но и от их временных производных. При этом удельная внутренняя энергия [1] и температура начала плавления (при постоянном давлении) [2] становятся функциями скорости изменения температуры; обсуждается возможность проявления аномалий