Список литературы

[1] *Barengolts S.A., Litvinov E.A.* // Proc. 38th IFES. Vienna, 1991. P. P1–P8.
[2] *Shkuratov S.I.* // Surf. Sci. 1992. Vol. 266. P. 88–99.
[3] *Елинсон М.И., Васильев Г.Ф.* Автоэлектронная эмиссия. М.: Физматгиз, 1958. 272 с.
[4] *Barengolts S.A., Litvinov E.A., Uimanov I.V.* // Surf. Sci. 1992. Vol. 266. P. 132–136.
[5] *Баренгольц С.А., Литвинов Е.А.* // СФХТ. 1989. Т. 2. № 8. С. 26–28.
[6] *Брэндон Д.* // Автоионная микроскопия. М.: Мир, 1971. Гл. 4. С. 59–74.
[7] *Barbour J.P., Charbonnier F.M., Dolan W.W.* et al. // Phys. Rev. 1960. Vol. 117. N 6. P. 1452–1459.
[8] *Hirsch J.E., Marsiglio F.* // Physica C. 1990. Vol. 172. P. 265–266.
[9] *Wijngaarden R.J., Scholtz J.J., Van Eenige E.N., Griessen R.* // High Pressure Research. 1991. Vol. 7,8. N 1–3. P. 33–37.
[10] *Золоторевский В.С.* Механические свойства металлов. М.: Металлургия, 1983. Гл. 4. С. 105–145.
[11] *Таланцев Е.Ф., Ивченко В.А., Сюткин Н.Н.* // СФХТ. 1990. Т. 3. № 9. С. 2017–2022.
[12] *Muller E.W.* // Science. 1965. Vol. 149. P. 591–601.
[13] *Cava R.J., Batlogg B., Rabe K.M.* et al. // Physica C. 1988. Vol. 156. N 5. P. 523–527.
[14] *Shkuratov S.I., Ivanov S.N., Shilimanov S.N.* // Surf. Sci. 1992. Vol. 266. P. 224–231.

Институт электрофизики
Екатеринбург

Поступило в Редакцию
14 мая 1992 г.
В окончательной редакции
23 ноября 1992 г.

02;03 *Журнал технической физики, т. 63, в. 8, 1993*

КОЭФФИЦИЕНТЫ ПЕРЕНОСА ПЛОТНОГО ГАЗА ИЗ МОЛЕКУЛ С ТВЕРДОЙ СЕРДЦЕВИНОЙ

В.И.Курочкин, С.В.Цаплин

В предыдущей работе одного из авторов [1] рассмотрено кинетическое уравнение для плотных газов из молекул с твердой сердцевиной, т.е. потенциал взаимодействия которых состоит из суммы потенциала твердых сфер диаметром $\sigma\varphi_r(r)$ и хвоста $\varphi_s(r)$, учитывающего взаимодействие частиц на расстоянии $r > \sigma$. Кинетическое уравнение получено из точного первого уравнения Грэда путем аппроксимации двухчастичной функции распределения, предложенной Хоффманом и Кэртиссом [2]. В работе [1] получены аналитические выражения для коэффициентов переноса в первом порядке по параметру взаимодействия $\varepsilon' = \max|\varphi_s(r)|/kT$. В данной работе полученные в [1] выражения используются для расчета коэффициентов вязкости и теплопроводности.

Для расчета коэффициентов переноса плотного газа в первом порядке по параметру взаимодействия необходимо рассчитать в этом приближении давление p и коэффициенты $a(m,n)$, $\omega(m,n)$, $l(m,n)$ и ω_n, для которых получено

$$p = \left[1 + \frac{2\pi}{3}n\sigma^3 g(\sigma)\right] nkT - \frac{2\pi}{3}n^2 \int\limits_{\sigma}^{\infty} \varphi_s' g(r) r^3 dr, \tag{1}$$

$$a(m,n)=\frac{\sigma}{kT}\int\limits_1^\infty dx\int\limits_0^1 dy\varphi_s'(x\sigma)\frac{y^{n-1}}{(x^2+y^2-1)^{m/2}},\tag{2}$$

$$\omega(m,n)=\frac{\sigma}{kT}\int\limits_1^\infty dx\int\limits_0^1 dy\varphi_s'(x\sigma)\chi(x\sigma)\frac{y^{n-1}}{(x^2+y^2-1)^{m/2}},\tag{3}$$

$$l(m,n)=\frac{1}{kT}\int\limits_1^\infty dx\int\limits_0^1 dy\varphi_s'(x\sigma)x\frac{y^{n-1}}{(x^2+y^2-1)^{m/2}},\tag{4}$$

$$\omega_n=\frac{\sigma^{-n}}{kT}\int\limits_1^\infty \varphi_s'(r)\chi(r)r^n dr,\tag{5}$$

где $x=r/\sigma$ — безразмерная координата.

Для расчета соотношений (1)–(5) необходимо знать бинарную функцию распределения равновесного состояния $g(r)$ или связанную с ней функцию

$$\chi(r)=g(r)\exp[\varphi(r)/kT],\tag{6}$$

причем в формулах (2)–(5) достаточно знать функцию $\chi(r)$ в приближении твердых сфер, так как коэффициенты $a(m,n)$, $\omega(m,n)$, $l(m,n)$ и ω_n уже имеют первый порядок по параметру взаимодействия.

В данной работе для расчета функций $g(r)$ и $\chi(r)$ используется известное уравнение Перкуса-Йевика [3]

$$\chi(r)=1+n\int[g(r')-\chi(r')]\,[g(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)-1]\,d\mathbf{r}'.\tag{7}$$

Пусть далее $\varphi_s'(r)=\varepsilon f(x)$, где ε — глубина потенциальной ямы потенциала взаимодействия. Представим функцию $\chi(r)$ в виде ряда по параметрам плотности $\rho(2\pi/3)n\sigma^3$ и взаимодействия $\varepsilon'=\varepsilon/kT=1/\tau$, где $\tau=kT/\varepsilon$ — приведенная температура. При этом с точностью до членов первого порядка по ε' будем иметь

$$\chi(r)=\sum_{i=0}^{\infty}\left(\chi_i^{(0)}(x)+\chi_i^{(1)}(x)/\tau\right)\rho^i,\quad \chi_i^{(0)}(x)=1,\quad \chi_i^{(1)}(x)=0,\tag{8}$$

где $\chi_i^{(0)}(x)$ — соответствует разложению по параметру плотности ρ функции $\chi(r)$ для твердых сфер.

Подставляя разложение (8) в уравнение (7) с учетом (6) и собирая члены одинаковых порядков по ε' и ρ, получим систему уравнений для определения функций $\chi_i^{(0)}(x)$ и $\chi_i^{(1)}(x)$ в виде

$$x\chi_{i+1}^{(0)}(x)=3\int\limits_0^1\left\{2xs\chi_i^{(0)}(s)-\sum_{k=0}^{i}\chi_k^{(0)}(s)H_{i-k}^{(0)}(x,s)\right\}sds,\tag{9}$$

$$x\chi_{i+1}^{(1)}(x) = 3\int_0^1 \left\{2xs\chi_i^{(1)}(s) - \sum_{k=0}^{i} \chi_k^{(1)}(s)H_{i-k}^{(0)}(x,s) - \chi_k^{(0)}(s)H_{i-k}^{(1)}(x,s)\right\} sds +$$

$$+3\int_0^\infty \left\{2xs\chi_i^{(0)}f(s) - \sum_{k=0}^{i}\chi_k^{(0)}(s)f(s)H_{i-k}^{(0)}(x,s)\right\} sds. \tag{10}$$

Здесь

$$H_i^{(0)}(x,s) = \int \chi_i^{(0)}(t)tdt, \tag{11}$$

$$H_i^{(1)}(x,s) = \int \left[\chi_i^{(0)}(t)f(t) - \chi_i^{(1)}(t)\right] tdt, \tag{12}$$

где интегрирование по t производится от $\max(1, |x-s|)$ до $(s+x)$.

Для функций $\chi_1^{(0)}$ аналитическое решение известно [3]. Решение для $\chi_2^{(0)}$ получено в работе [2]. Для функций $\chi_3^{(0)}(x)$ и $\chi_4^{(0)}(x)$ получено численное решение, которое приближенно, с точностью до 2%, может быть представлено с помощью формул

$$x\chi_3^{(0)} = \begin{cases} (1.39 - 1.95x + 0.64x^2), & 1 \leqslant x \leqslant 2, \\ (-3.82 + 3.42x - 0.74x^2), & 2 \leqslant x \leqslant 2.5, \\ 0.15(x-3.5)^2 - 0.04(3.5-x), & 2.5 \leqslant x \leqslant 3.5, \\ 0, & x \geqslant 3.5, \end{cases} \tag{13}$$

$$x\chi_4^{(0)} = \begin{cases} (0.61 - 0.90x + 0.33x^2), & 1 \leqslant x \leqslant 1.75, \\ (1.85 - 1.86x - 0.45x^2), & 1.75 \leqslant x \leqslant 2.5, \\ (1.69 - 1.18x + 0.20x^2), & 2.5 \leqslant x \leqslant 3.25, \\ 0, & x \geqslant 3.25. \end{cases} \tag{14}$$

Проведенные авторами расчеты показали, что при разложении функции $\chi(x)$ в ряд по параметру плотности при $\rho \leqslant 1$ для достижения точности расчетов порядка 2–3% достаточно взять первые четыре члена разложения по этому параметру. При $\rho > 1$ сходимость значительно ухудшалась. Величина ошибки аппроксимации по параметру взаимодействия имеет порядок τ^{-2}, поэтому полученные формулы имеет смысл использовать только в области приведенных температур $\tau^2 \gg 1$.

Авторами проведены предварительные численные расчеты коэффициентов вязкости и теплопроводности в области приведенных температур $\tau \sim 3$–8. В расчетах использовался модифицированный потенциал Леннарда-Джонса 12–6 (ЛДМ(12–6))

$$f(x) = \begin{cases} \infty, & x < 1, \\ 4(x^{-12} - x^{-6}), & x \geqslant 1. \end{cases} \tag{15}$$

Сравнение результатов расчета с табличными данными для аргона и азота (значения параметров потенциала брались из [4]) показало, что расхождение составляет 8–10% в диапазоне приведенных плотностей $\rho < 0.8$

и 10–15% при $\rho \leqslant 1.0$. Можно добиться уменьшения расхождения расчетных и табличных значений, если ввести слабую зависимость диаметра твердой сердцевины от температуры, как это делается в равновесной теории при исследовании уравнения состояния [3], или путем введения зависимости диаметра твердой сердцевины от энергии взаимодействия частиц при их столкновении в соответствии с более современными исследованиями, проведенными в [5].

Исследование данного вопроса, а также сравнительный анализ рассмотренной модели с другими теориями будут представлены в отдельной работе.

Список литературы

[1] *Курочкин В.И.* // ЖТФ. 1992. Т 62. Вып. 5. С. 1772–1778.

[2] *Hoffman D.H., Curtiss C.F.* // Phys. Fluids. 1964. Vol. 7. N 12. P. 1887–1897.

[3] *Крокстон К.* Физика жидкого состояния. М.: Мир, 1978. 400 с.

[4] *Севастьянов Р.М., Зыков Н.А.* Термодинамические свойства газов при высоких давлениях // Труды ЦАГИ. 1977. Вып. 1874.

[5] Квазиклассическая теория столкновений в газах. Новосибирск: Наука, 1989. 201 с.

Самарский университет

Поступило в Редакцию
12 ноября 1992 г.
В окончательной редакции
26 апреля 1993 г.