

Модельное кинетическое уравнение для многоатомных газов с учетом вращательных степеней свободы молекул

© А.Б. Поддоскин

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, 105005, Россия

Предложено модельное кинетическое уравнение для многоатомного газа, учитывающее вращательные степени свободы молекул. Три свободных параметра модели связываются с парциальными факторами Эйкена, которые, в свою очередь, зависят от интенсивности обмена энергией между поступательными и вращательными степенями свободы и от частоты упругих и неупругих столкновений молекул газа.

Ключевые слова: многоатомный газ, кинетическое модельное уравнение, вращательные степени свободы молекул.

В отличие от простого (одноатомного) молекулы многоатомного газа обладают внутренними степенями свободы, что существенно усложняет кинетическое уравнение [1]. Как показывают расчеты, для большинства молекулярных газов в диапазоне температур 10–1 000 К колебательные степени свободы можно считать «замороженными», а вращательные степени свободы рассматривать на основе классической механики. Однако отсутствие надежных моделей потенциала межмолекулярного взаимодействия приводит к необходимости построения модельных кинетических уравнений [2–6]. В частности, для решения граничной задачи в [3] использовалась кинетическая модель, которую можно рассматривать как обобщение модели Бхатнагара, Гросса и Крука (БГК-модели). Одним из недостатков БГК-модели [7] является то, что при решении задач с одновременным тепло- и массопереносом возникает неоднозначность выбора свободного параметра модели, что характерно и для обобщенной модели [3]. Поэтому в [4] было предложено модельное уравнение, которое содержит два свободных параметра и тем самым устраняет данный недостаток. В рамках модели [4] был рассчитан весь комплекс газокинетических коэффициентов скольжения и скачков макропараметров двухатомного газа на слабо искривленной поверхности [5]. Для многоатомного газа аналогичные расчеты были выполнены в [6].

В настоящей работе путем развития подхода [4] предложено модельное кинетическое уравнение для многоатомного газа с вращательными степенями свободы молекул, которое содержит три сво-

бодных параметра; при этом потоки теплоты, связанные с переносом поступательной и вращательной энергии молекул, разведены. Эти параметры выражены через парциальные факторы Эйкена [8, 9].

Модельное кинетическое уравнение. При рассмотрении стационарных задач в линейной постановке функцию распределения молекул молекулярного газа можно записать в виде [1]

$$f(r, \mathbf{v}, \omega) = f_0(1 + \Phi(r, \mathbf{v}, \omega)),$$

где f_0 — равновесная максвелловская функция распределения, для многоатомного газа

$$f_0 = n_0 \left(\frac{m}{2\pi k T_0} \right)^{3/2} \frac{(I_1 I_2 I_3)^{1/2}}{(2\pi k T_0)^{3/2}} \exp \left(-\frac{m\mathbf{v}^2}{2kT_0} - \frac{I_\alpha \omega_\alpha^2}{2kT_0} \right),$$

$$f_0 = n_0 \left(\frac{m}{2\pi k T_0} \right)^{3/2} \frac{(I_1 I_2 I_3)^{1/2}}{(2\pi k T_0)^{3/2}} \exp \left(-\frac{m\mathbf{v}^2}{2kT_0} - \frac{I_\alpha \omega_\alpha^2}{2kT_0} \right);$$

I_α — компоненты момента инерции многоатомной молекулы; m , \mathbf{v} , ω_α — масса, линейная и угловая скорости молекулы; k — постоянная Больцмана; n_0 , T_0 — равновесные концентрация и температура газа. Здесь и далее по повторяющимся греческим индексам проводится суммирование.

Нормировка f_0 соответствует соотношению

$$n_0 = \int f_0 d^3 \omega d^3 \mathbf{v}.$$

Предлагается модельное кинетическое уравнение для несжимаемого многоатомного газа, в котором учитываются вращательные степени свободы молекул, в виде

$$c \nabla \Phi = \varepsilon (\mathbf{v} + (c^2 + c_\omega^2 - 3) \boldsymbol{\tau} + 2(cG) + \xi_1 (c\mathbf{Q}^t) (c^2 - 5/2) + \xi_2 (c\mathbf{Q}^r) (c_\omega^2 - 3/2) - \Phi), \quad (1)$$

где $c^2 = m\mathbf{v}^2/(2kT_0)$; $c_\omega^2 = I_\alpha \omega_\alpha^2/(2kT_0)$; $G = \sqrt{m/(2kT_0)} u$ — безразмерная скорость; \mathbf{Q}^t , \mathbf{Q}^r — безразмерные составляющие потока теплоты, связанные с переносом поступательной (трансляционной) энергии молекул и переносом вращательной (ротационной) энергии; ε , ξ_1 , ξ_2 — свободные параметры модели.

В отличие от моделей [5, 6] в (1) «разведены» потоки \mathbf{Q}^t и \mathbf{Q}^r , при этом появляется дополнительный параметр ξ_2 .

Используя обозначение [5, 6]

$$(\Phi, \Psi) = \int e^{-c^2 - c_\omega^2} \Phi \Psi \frac{d^3 c}{\pi^{3/2}} \frac{d^3 c_\omega}{\pi^{3/2}},$$

моменты v , τ , τ^t , τ^r , \mathbf{G} , \mathbf{Q}^t , \mathbf{Q}^r можно представить следующим образом:

$$\begin{aligned} v &= (1, \Phi), \tau = \frac{1}{3} \left((c^2 + c_\omega^2 - 3), \Phi \right), G = (c, \Phi), \\ \tau^t &= \frac{2}{3} \left(\left(c^2 - \frac{3}{2} \right), \Phi \right), \tau^r = \left((c_\omega^2 - 3/2), \Phi \right), \\ \mathbf{Q}^t &= \left(c \left(c^2 - \frac{5}{2} \right), \Phi \right), \mathbf{Q}^r = \left(c (c_\omega^2 - 3/2), \Phi \right), \end{aligned}$$

где τ^t , τ^r — отклонения трансляционной и ротационной температур от равновесной.

Применяя метод Чепмена — Энскога к уравнению (1) и ограничиваясь при этом приближением первого порядка, получим функцию распределения. Сравнивая ее с распределением Чепмена — Энскога [1]

$$\begin{aligned} f_{Ch} &= f_0 \left(1 + v + (c^2 + c_\omega^2 - 3) \tau + 2c_\alpha G_\alpha + \Phi_{Ch} \right), \\ \Phi_{Ch} &= a_1 c_\alpha g_\alpha (5/2 - c)^2 + a_2 c_\alpha g_\alpha (3/2 - c_\omega^2) - b_1 \left(c_\alpha c_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} c^2 \right) \Pi_{\alpha\beta}, \end{aligned} \quad (2)$$

где

$$\begin{aligned} g_\alpha &= \frac{\partial T}{T_0 \partial x_\alpha}, \Pi_{\alpha\beta} = \sqrt{\frac{m}{2kT_0}} \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha}, \\ \varepsilon &= \frac{2}{b_1}, \xi_1 = \frac{4}{5} \left(1 - \frac{b_1}{2a_1} \right), \xi_2 = \frac{3}{4} \left(1 - \frac{b_1}{2a_2} \right), \end{aligned}$$

и вычисляя с помощью функции (2) потоки теплоты

$$q_\alpha^t = P_0 \sqrt{2kT_0 / m} Q_\alpha^t, q_\alpha^r = P_0 \sqrt{2kT_0 / m} Q_\alpha^r, q_\alpha = q_\alpha^t + q_\alpha^r$$

и тензор напряжений

$$p_{\alpha\beta} = 2P_0(c_{\alpha}c_{\beta}, \Psi_{Ch}) = 2P_0\tau_{\alpha\beta}^{Ch},$$

получаем

$$\tau_{\alpha\beta}^{Ch} = -\frac{b_1}{2}\Pi_{\alpha\beta}, Q_{\alpha}^t = -\frac{5a_1}{4}g_{\alpha}, Q_{\alpha}^r = -\frac{3a_2}{4}g_{\alpha}.$$

Сравнивая последние выражения с гидродинамическим определением тензора напряжений (закон Ньютона) и вектора теплового потока (закон Фурье), находим

$$b_1 = \frac{4\mu}{\rho_0} \sqrt{\frac{m}{2kT_0}} = \frac{4\lambda}{\sqrt{\pi}}, a_1 = \frac{4T_0}{5P_0} \sqrt{\frac{m}{2kT_0}}\chi^t, a_2 = \frac{4}{3} \frac{T_0}{P_0} \sqrt{\frac{m}{2kT_0}}\chi^r,$$

где μ — коэффициент динамической вязкости; χ^t, χ^r — коэффициенты переноса поступательной и внутренней (вращательной) энергии; $\lambda = \mu/\rho_0 \sqrt{\pi m / (2kT_0)}$ — средняя длина свободного пробега молекул газа.

Воспользуемся определениями полного f , парциальных (трансляционного) f^t и (ротационного) f^r факторов Эйкена [10]:

$$f = \frac{\chi}{c_v\mu}, f^t = \frac{\chi^t}{c_v^t\mu}, f^r = \frac{\chi^r}{c_v^r\mu},$$

в которых c_v — удельная теплоемкость при постоянном объеме, c_v^t и c_v^r — удельные теплоемкости, обусловленные энергией поступательного движения и внутренней (вращательной) энергией молекул. Тогда параметры модели ξ_1, ξ_2 можно записать в виде

$$\xi_1 = \frac{4}{5} \left(1 - \frac{5}{3f^t} \right), \xi_2 = \frac{4}{3} \left(1 - \frac{1}{f^r} \right).$$

В работах [8, 9] были получены f^t, f^r, f , имеющие следующий вид:

$$f^t = \frac{5}{2} - \frac{10}{3\pi} \frac{c_v^t}{kZ\delta} \left(\frac{5}{2} - \beta^r \right), \quad (3)$$

$$f^r = \beta^r \left[1 + \frac{2}{kZ\delta} \left(\frac{5}{2} - \beta^r \right) \right], \quad (4)$$

$$f = \frac{15k}{4c_v} + \frac{c_v^r}{c_v} \beta^r - \frac{2c_v^r}{\pi Z \delta} \left(\frac{5}{2} - \beta^r \right)^2, \quad (5)$$

где

$$\delta = 1 + \frac{2}{\pi Z} \left(\beta^r + \frac{5c_v^r}{3k} \right).$$

Отметим, что формулы Мэсона — Мончика (3)–(5) справедливы в общем случае для вращательно- и колебательно-возбужденных молекул. В то же время в настоящей работе внутренним степеням свободы соответствуют только вращательные моды, поэтому в формулах (3)–(5) используются следующие обозначения: $Z = 16\tau_{tr} / (5\pi\tau_c)$ — число неупругих столкновений, или интенсивность обмена энергией между поступательными и внутренними (вращательными) степенями свободы; τ_c^{-1} — частота упругих столкновений; τ_{tr}^{-1} — частота неупругих столкновений, сопровождающихся обменом энергии между вращательными и поступательными степенями свободы (RT-обмен); $\beta^r = \rho D^r / \mu$; D^r — коэффициент диффузии внутренней энергии молекул.

Для проведения конкретных расчетов с использованием модели (1) можно воспользоваться экспериментальными данными для коэффициентов переноса и теплоемкости, а значения интенсивности обмена энергией Z взять из результатов ультразвуковых измерений [11, 12] или использовать формулы для указанных величин, полученные в рамках других теорий [1].

Параметры ξ_1 , ξ_2 в уравнении (1) определяются величиной факторов Эйкена f^t , f^r , следовательно, параметры модели (1) однозначно определены.

Легко проверить, что из модели (1) получаются все законы сохранения: массы, энергии, импульса, момента импульса.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Жданов В.М., Алиевский М.Я. *Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах*. Москва, Наука, 1989, 335 с.
- [2] Рыков В.А. Модельное кинетическое уравнение для газа с вращательными степенями свободы. *Изв. АН СССР МЖГ*, 1975, № 6, с. 107.
- [3] Латышев А.В., Юшканов А.А. Аналитическое решение задачи о скачке температуры в газе с вращательными степенями свободы. *Теорет. и мат. физика*, 1993, т. 95, № 3, с. 530.
- [4] Поддоскин А.Б., Юшканов А.А. Скольжение двухатомного газа вдоль плоской поверхности. *Изв. РАН. МЖГ*, 1998, № 5, с. 183.
- [5] Поддоскин А.Б., Юшканов А.А. О коэффициентах скольжения и скачках макропараметров двухатомного газа с вращательными степенями свобо-

- ды на слабо искривленной сферической поверхности. *Изв. РАН. МЖГ*, 2000, № 1, с. 163–173.
- [6] Поддоскин А.Б., Юшканов А.А. О скольжении и скачках макропараметров многоатомного газа с вращательными степенями свободы на слабо искривленной сферической поверхности. *Изв. РАН. МЖГ*, 2001, № 5, с. 194.
- [7] Яламов Ю.И., Поддоскин А.Б., Юшканов А.А. О граничных условиях при обтекании неоднородно нагретым газом сферической поверхности малой кривизны. *ДАН СССР*, 1980, т. 254, № 2, с. 343.
- [8] Mason E.A., Monchick L. Heat Conductivity of Polyatomic and Polar Gases. *J. Chem. Phys.*, 1962, vol. 36, p. 1622.
- [9] Monchick L., Pereira A.N.G., Mason E.A. Heat Conductivity of Polyatomic and Polar Gases and Gas Mixtures. *J. Chem. Phys.*, 1965, vol. 42, p. 3241.
- [10] Ферцигер Дж., Капер Г. *Математическая теория процессов переноса в газах*. Москва, Мир, 1976, 554 с.
- [11] Carnevale E.H., Carey C., Larson G. Ultrasonic Determination of Rotational Collision Numbers and Vibrational Relaxation Times of Polyatomic Gases at High Temperatures. *J. Chem. Phys.*, 1967, vol. 47, p. 2829.
- [12] Prangma G.J., Alberga A.H., Beenakker J.J.M. Ultrasonic Determination of the Volume Viscosity of N_2 , CO, CH_4 , CO_2 between 77 and 300 K. *Physica*, 1973, vol. 64, p. 278.

Статья поступила в редакцию 05.02.2014

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Поддоскин А.Б. Модельное кинетическое уравнение для многоатомных газов с учетом вращательных степеней свободы молекул. *Инженерный журнал: наука и инновации*, 2014, вып. 1. URL: <http://engjournal.ru/catalog/fundamentals/physics/1189.html>

Поддоскин Александр Борисович родился в 1951 г., окончил физический факультет МОПИ им. Н.К. Крупской в 1972 г. Д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры «Физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор более 100 научных работ в области кинетической теории газов и динамики аэрозольных частиц. e-mail: apoddoskin@yandex.ru