

РАСЧЕТ СТОЛКНОВИТЕЛЬНОЙ ЧАСТИ КОЭФФИЦИЕНТОВ ВЯЗКОСТИ И  
ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ В ПЕРВОМ ПРИБЛИЖЕНИИ ПО ПЛОТНОСТИ  
ДЛЯ ПОТЕНЦИАЛА СЮЗЕРЛЕНДА

Ю.Е.Горбачев, И.Д.Каганович

В рамках кинетической теории газов исследовано влияние притягивающей части потенциала межмолекулярного взаимодействия на столкновительные части поправок по плотности к коэффициентам вязкости и теплопроводности плотного газа. Показано, что учет притяжения уменьшает столкновительную часть коэффициента теплопроводности и увеличивает столкновительную часть коэффициента вязкости.

Попытки рассчитать первые поправки по плотности к коэффициентам переноса (к.п.) в рамках кинетической теории приводили к сложным кинетическим уравнениям. Получить из них аналитические формулы для к.п. без каких-либо грубых приближений (типа времени релаксации для интеграла столкновений /1/, использования модельного интеграла столкновений /2/) не удавалось. Поэтому возникает потребность в получении асимптотических формул, служащих эталонными для других методов. Такой расчет для случая степенного потенциала приведен в /3/, где исследуется влияние "мягкости" взаимодействия на к.п. умеренно плотного газа.

Здесь мы остановимся на анализе влияния притягивающей части потенциала на первые поправки по плотности к к.п., причем только на их столкновительную часть /4/.

Столкновительная часть коэффициента теплопроводности может быть представлена в виде  $\lambda^p = \lambda^{p1} + \lambda^{p2}$  /4/, где  $\lambda^{p1}$  от-

вечает за перенос потенциальной энергии и в приближении первого полинома Сонина имеет вид

$$\mathcal{R}^{\varphi 1} = \frac{\mathcal{R}^0 n}{15} \int \frac{\Phi}{T} (\vec{G}_1 + \vec{G}_2) S_{\infty}^{(2)} [\vec{G}_1 S_{3/2}^1(G_1^2) + \vec{G}_2 S_{3/2}^1(G_2^2)] \times \\ \times f_1^0 f_2^0 d^3 \vec{G}_1 d^3 \vec{G}_2 d^3 \vec{r}_{12}, \quad (1)$$

где  $\mathcal{R}^0$  - коэффициент теплопроводности в нулевом приближении по плотности,  $\Phi$  - потенциал взаимодействия,  $G = v(\kappa T/m)^{-1/2}$  - безразмерная скорость,  $f_{1,2}^0$  - обезразмеренные максвелловские функции распределения  $f_q^0(G_q) = (2\pi)^{3/2} \exp(-G_q^2)$ ,  $S_{\infty}^{(2)}$  - оператор эволюции /4/, действующий только на скорость частицы.

Используя свойства оператора эволюции

$$S_{\infty}^{(2)}(G_1^2 + G_2^2) = G_1^2 + G_2^2 + \Phi/T,$$

после элементарных вычислений получим

$$\mathcal{R}^{\varphi 1} = -\frac{\mathcal{R}^0 n}{3} \frac{1}{T^2} \frac{d}{d(1/T)^2} B_2(T), \quad (2)$$

где вириальный коэффициент представляется в виде

$$B_2(T) = \frac{1}{2} \int (1 - \exp(-\Phi/T)) d^3 \vec{r}_{12}. \quad (3)$$

Для потенциала Сюзерленда

$$\Phi(r) = D[(\sigma/r)^5 - (\sigma/r)^6], \quad s \rightarrow \infty,$$

$$B_2(T) = \frac{2}{3} \pi \sigma^3 [1 - D/T], \quad (4)$$

и, следовательно,

$$\mathcal{R}^{\varphi 1} = \frac{\pi}{9} \mathcal{R}^0 n \sigma^3 \frac{D}{T}. \quad (5)$$

Вторая часть коэффициента теплопроводности определяется столкновительным переносом энергии и равна /4/

$$\mathcal{R}^{\varphi 2} = \frac{\mathcal{R}^0 n}{15} \int (\vec{G}_1 + \vec{G}_2) \frac{1}{T} \frac{\partial \Phi}{\partial \vec{r}_{12}} \vec{r}_{12} S_{\infty}^{(2)} (\vec{G}_1 S_{3/2}^1(G_1^2) + \vec{G}_2 S_{3/2}^1(G_2^2)) \times$$

$$\times f_1^0 f_2^0 d^3 \vec{G}_1 d^3 \vec{G}_2 d^3 \vec{r}_{12}. \quad (6)$$

После интегрирования по скорости центра масс получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{R}^{\Phi 2} = & \frac{\mathcal{R}^0 n}{30(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{T} \int \frac{\partial \Phi}{\partial \vec{r}_{12}} \left\{ \left(1 - \frac{\Phi}{T}\right) \vec{r}_{12} - S_{\infty}^{(2)}(\vec{G}_{12}, \vec{r}_{12}) \vec{G}_{12} \right\} \times \\ & \times \exp(-G_{12}^2/2 - \Phi/T) d^3 \vec{r}_{12} d^3 \vec{G}_{12}, \end{aligned} \quad (7)$$

где  $\vec{G}_{12} = \vec{G}_1 - \vec{G}_2$ .

Вклад от первого слагаемого в фигурных скобках (7) легко вычисляется, что для потенциала (4) дает

$$-\frac{\mathcal{R}^0 n}{5} T \frac{dB_2}{dT} = -\frac{2\mathcal{R}^0 n}{15} \pi \sigma^3 \frac{D}{T}. \quad (8)$$

Наибольшую сложность вызывает интегрирование второго слагаемого в (7). Будем его вычислять, используя разложение по параметру  $D/T$ .

После громоздких вычислений, внесенных в приложение, получаем

$$\mathcal{R}^{\Phi} = \frac{2\pi}{5} \mathcal{R}^0 n \sigma^3 [1 - \nu_1 D/T], \quad \nu_1 \approx 0,503. \quad (9)$$

Столкновительная часть вязкости в приближении одного полинома Сонина записывается в форме /4/:

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}^{\Phi} = & \frac{2\mathcal{Q}^0 n}{5} \frac{1}{T} \int \Phi' \frac{1}{r_{12}} S_{\infty}^{(2)} \left[ (\vec{r}_1 \vec{G})^2 - \frac{1}{3} r_{12}^2 G_1^2 + (\vec{r}_{12} \vec{G})^2 - \right. \\ & \left. - \frac{1}{3} r_{12}^2 G_2^2 \right] f_1^0 f_2^0 d^3 \vec{G}_1 d^3 \vec{G}_2 d^3 \vec{r}_{12}. \end{aligned} \quad (10)$$

После аналогичных вычислений имеем

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}^{\Phi} = & -\frac{\mathcal{Q}^0 n}{5} \left[ \frac{1}{4(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{T} \int \Phi' \frac{1}{r_{12}} (\vec{r}_{12} \cdot S_{\infty}^{(2)}(\vec{G}_{12}))^2 \exp\left(-\frac{G_{12}^2}{T} - \frac{\Phi}{T}\right) + \right. \\ & \left. + \frac{5}{2} B_2 + T \frac{dB_2}{dT} \right]. \end{aligned} \quad (11)$$

Для потенциала Сюзерленда последнее выражение с использованием вычисленных в приложении разложениям по параметру  $D/T$  интегралов  $I_1$  и  $I_2$  преобразуется к виду

$$\eta^{\varphi} = \frac{4\pi}{15} \eta^{\circ} n \sigma^3 [1 - \gamma_2 D/T], \quad \gamma_2 \approx -0,368. \quad (12)$$

Используя результаты работы /3/, можно учесть мягкость сердцевины потенциала и влияние притяжения с помощью составной формулы, оценивая тем самым к.п. для потенциала Леннарда-Джонса ( $B-S$ ):

$$\lambda^{\varphi''} \approx \lambda^{\varphi} / \left( \frac{2\pi}{15} n \sigma^3 \lambda^{\circ} \right) = \left( \frac{D}{T} \right)^{3/5} \left( 1 + \frac{12\gamma - 43}{6s} \right) - \gamma_1 \frac{D}{T}, \quad (13)$$

$$\eta^{\varphi''} \approx \eta^{\varphi} / \left( \frac{4\pi}{15} n \sigma^3 \eta^{\circ} \right) = \left( \frac{D}{T} \right)^{3/5} \left( 1 + \frac{2\gamma - 8}{s} \right) - \gamma_2 \frac{D}{T}, \quad (14)$$

где  $\gamma$  - постоянная Эйлера ( $\gamma \approx 0,577$ ), а  $s$  - показатель степени в (4).

Поведение величин  $\lambda^{\varphi''}$  и  $\eta^{\varphi''}$ , определяемое выражениями (13) и (14) (сплошные линии) в зависимости от обратной обезразмеренной температуры  $T^{*-1} = D/T$  для  $s = 12$  приведено на рис. I (1 -  $\eta^{\varphi''}$ , 2 -  $\lambda^{\varphi''}$ ). Пунктиром обозначены соответствующие величины, рассчитанные без учета притяжения. Как видно из графика

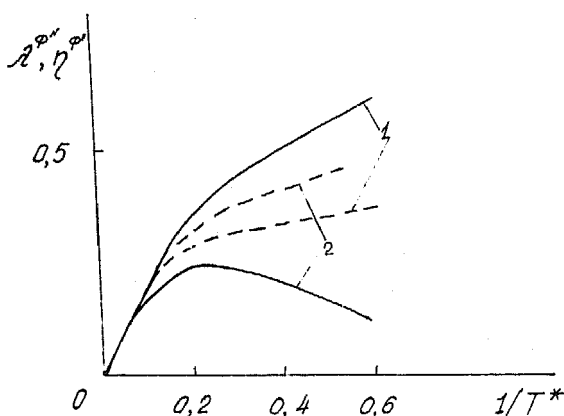


Рис. I

ка, учет притяжения существенно влияет на рассматриваемые поправки к коэффициенту переноса, изменяя характер поведения при  $T \sim 5D$ . С увеличением температуры вклад этих факторов падает и становится пренебрежимо малым при  $T > 10D$ .

### Приложение

Разбивая потенциал (4) на две части  $\Phi = \Phi^{(n)} + \Phi^{(a)}$ , где  $\Phi^{(n)} = D(\sigma/r)^5$ ,  $S \rightarrow \infty$ , а  $\Phi^{(a)} = -D(\sigma/r)^6$ , представим вклад в интеграл (7) от второго слагаемого в фигурных скобках выражения (7) в виде

$$I_1 + I_2 = \int \left( \frac{\partial \Phi^{(n)}}{\partial \vec{r}} + \frac{\partial \Phi^{(a)}}{\partial \vec{r}} \right) S_{\infty}^{(2)}(\vec{G}, \vec{r}) \exp\left(\frac{G^2}{2} - \frac{\Phi}{T}\right) d^3 r d^3 \vec{G}, \quad (\text{п.1})$$

где  $\vec{r} = \vec{r}_{12}$ ,  $\vec{G} = \vec{G}_{12}$ .

В первом порядке по параметру  $D/T$  для вычисления  $I_2$  достаточно оператор эволюции определить по  $\Phi^{(n)}$ , то есть по потенциалу твердых сфер. Для угла  $\chi$  между векторами  $\vec{G} = S_{\infty}^{(2)}(\vec{G})$  и  $\vec{r}$  из геометрического анализа картины столкновения, представленной на рис. 2, получим соотношения:  $\chi = 2 \arcsin\left(\frac{r}{\sigma} \sin \vartheta\right) - \vartheta$ , где  $\vartheta$  - угол между  $\vec{G}$  и  $\vec{r}$ . Тогда получим

$$I_2 = 24\pi (2\pi)^{3/2} \sigma^3 D \left[ 1 - \frac{3}{2} \vartheta_2 \right], \quad (\text{п.2})$$

где  $\vartheta_2$  - точно вычисляемый интеграл

$$\begin{aligned} \vartheta_2 &= - \int_1^{\infty} dx x^{-4} \int_0^{\arcsin(1/x)} d\vartheta \sin \vartheta [\cos^2 \chi - \cos^2 \vartheta] = \\ &= \pi - 196/63 \approx 0,030. \end{aligned} \quad (\text{п.3})$$

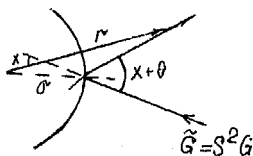


Рис. 2

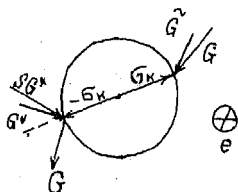


Рис. 3

Для расчета  $I_1$  воспользуемся известным свойством интегралов движения (их скобки Пуассона с функцией Гамильтона равны нулю) /4/, которое для тензора  $S_\infty^{(2)}(\vec{G}, \vec{G})=0$  записывается в виде

$$\left( \frac{\partial \Phi / T}{\partial \vec{r}} \frac{\partial}{\partial \vec{G}} - \vec{G} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \right) S_\infty^{(2)}(\vec{G}, \vec{G}) = 0.$$

Тогда  $I_1$  переписывается в виде

$$I_1 = -T \int_{|\vec{r}| \leq \sigma} \vec{G} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} [S_\infty^{(2)}((\vec{G} \cdot \vec{r}) \vec{G})] \vec{G} \exp\left(-\frac{G^2}{2} - \frac{\Phi}{T}\right) d^3 \vec{r} d^3 \vec{G}. \quad (\text{п.4})$$

Так как вследствие соотношения  $\frac{d\Phi^{(r)}/T}{dr} \exp(-\Phi^{(r)}/T) = -\delta(r-\sigma)$  в подынтегральное выражение в  $I_1$  входит  $\delta$ -функция, то интегрирование в (п.4) проводится при  $r = \sigma$ . В результате получаем

$$I_1 = T \sigma^3 e^{D/T} \int_{\vec{G} \cdot \vec{k} < 0} d^2 \vec{k} d^3 \vec{G} (\vec{G} \cdot \vec{k}) (\vec{G} \cdot \vec{k}) : (\vec{G} \vec{G} + \vec{G}^* \vec{G}^*) \exp(-G^2/2),$$

$$\vec{G} = S_\infty^{(2)} \vec{G}(\sigma \vec{k}), \quad \vec{G}^* = S_\infty^{(2)} \vec{G}(-\sigma \vec{k}). \quad (\text{п.5})$$

Расположение векторов  $\vec{G}$ ,  $\vec{G}^*$  и  $\vec{G}^*$  показано на рис. 3,  $\vec{k}$  - орт в направлении  $\vec{r}$ , а  $\vec{e}$  - орт в направлении  $\vec{G} \times \vec{k}$ . В первом порядке по параметру  $D/T$  имеем

$$\vec{G} = \vec{G} \left(1 + \frac{D}{TG^2}\right) - \alpha \vec{e} \times \vec{G}, \quad \vec{G}^* = \vec{G}^* \left(1 + \frac{D}{TG^2}\right) + \alpha \vec{e} \times \vec{G},$$

$$\alpha = \frac{\sigma \sin \vartheta}{TG^2} \int_0^\infty \frac{d\Phi^{(a)}}{dr} \frac{dr}{(r^2 - \sigma^2 \sin^2 \theta)}, \quad (\text{п.6})$$

где  $\alpha$  - угол рассеяния на потенциале  $\varphi^{(a)}$ , а  $\theta$  - угол между  $\vec{G}$  и  $\vec{k}$ . Подставляя эти соотношения в (п.5), найдем

$$I_1 = -6(2\pi)^{5/2} T \sigma^3 e^{D/T} \left[ 1 - \frac{D}{T} \left( \frac{2}{5} + 12\vartheta_1 \right) \right],$$

$$\gamma_1 = 5\pi/48 - 14/45 \approx 0,0161. \quad (\text{п.7})$$

Полученные представления для  $I_1$  и  $I_2$  (п.2), (п.7), а также соотношения (5) и (8) позволяют записать для  $\mathcal{L}^{\text{Ф}}$

$$\mathcal{L}^{\text{Ф}} = \frac{2\pi}{5} \mathcal{L}^0 \pi \sigma^3 \left[ 1 - \frac{2D}{T} \left( \frac{8}{15} + 6\gamma_1 - \frac{3}{2} \gamma_2 \right) \right] \quad (\text{п.8})$$

Используя конкретные значения  $\gamma_1$  (п.7) и  $\gamma_2$  (п.3), получаем окончательное выражение для  $\mathcal{L}^{\text{Ф}}$  (9).

Поправка к коэффициенту вязкости (II) также может быть выражена через интегралы  $I_1$  и  $I_2$  :

$$\eta^{\text{Ф}} = -\eta^0 n \left[ (20(2\pi)^{3/2} T)^{-1} (I_1 + I_2) + \frac{1}{5} \left( \frac{3}{2} B_2 + \frac{d}{dT} (B_2 T) \right) \right]. \quad (\text{п.9})$$

С учетом явного вида  $I_1$ ,  $I_2$  и  $B$  получим

$$\eta^{\text{Ф}} = \frac{4\pi}{15} \pi \sigma^3 \left[ 1 - \frac{9}{2} \frac{D}{T} \left( 6\gamma_1 - \frac{3}{2} \gamma_2 - \frac{2}{15} \right) \right]. \quad (\text{п.10})$$

1. Bauerwinkel K. Die Vielteilichen T - Matrix und ihre Anwendung in der Theorie realer Gase von mittlerer Dichte. - Zs Naturforsch, 1969, B. 24a, H. 1, s. 22-51.
2. Rice S. A., Alnatt A. R. On the Kinetic Theory of Dense Fluids. VI. Singlet Distribution Function for Rigid Spheres with an Attractive potential// J. Chem. Phys. - 1961, Vol. 34, N 6, p. 2156-2165.
3. Snider R. F., McCourt F. R. Kinetic Theory of Moderately Dense Gases: Inverse Power Potentials// Phys. Fluids. - 1963, Vol. 6, N 7, p. 194-202.

4. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. — М.: Мир, 1976.—556 с.

Физико-технический  
институт АН СССР  
Ленинград

Поступила в редакцию  
7 июня 1989 г.