

Ташибетова А.Т.

РАСЧЕТЫ ЭФФЕКТИВНЫХ ДИАМЕТРОВ СТОЛКНОВЕНИЙ МОЛЕКУЛ ПО ДАННЫМ ОТ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ВЯЗКОСТИ И КОЭФФИЦИЕНТОВ ДИФФУЗИИ РАЗРЕЖЕННЫХ ГАЗОВ

Ташибетова А.Т.

ГАЗДЫҢ ТҮТҚЫРЛЫҒЫНА БАРИАЛДЫҚ КЛАСТЕРЛЕРІНІҢ ӘСЕРІ

A.T.Tashimbetova

INFLUENCE OF CLUSTERS ON BARIC DEPENDENCE OF VISCOSITY OF GASES

УДК 533.5

Для расчетов концентраций кластеров, как и других свойств, необходимо иметь сведения об эффективных диаметрах столкновений как функции температуры. Наиболее надежным источником таких данных служат данные по температурной зависимости коэффициента вязкости разреженного газа (газа Больцмана), т.е. – вязкости при условиях, когда он практически не зависит от давления. К настоящему времени такие данные приведены в справочной литературе по теплофизическим свойствам газов [1-12]

Ключевые слова: концентрация кластеров, диаметры и температура разреженных газов, методика определения эффективных диаметров газов.

Жалпы қысым аумағындағы газ в-на епептеулер жүргізілген. Кластерлерден құралатын в-ты жеткілікті түрде нығыздалған газдарды белгілі бариалдық тәуелділік анықтайды.

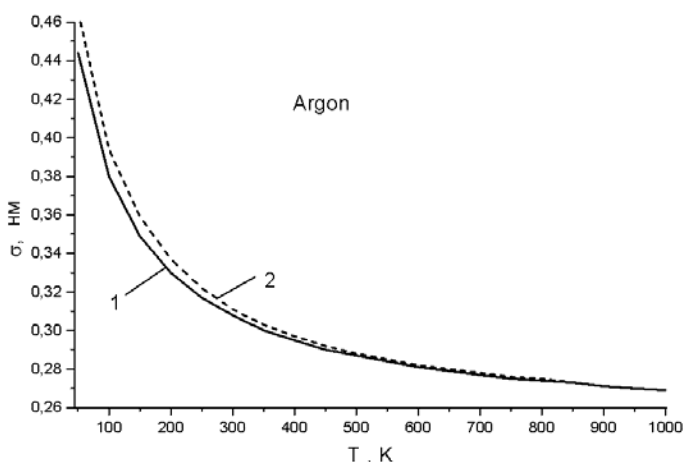
Кұқсас сөздер: кластерлерді концентрациясы, диаметрі және таратылған газдардың температурасы, газ тиімді диаметрі анықтау әдісі.

Calculations of viscosity of gases in wide rang of pressure are given. The contribution to viscosity of cluster subcomponents results in increase of viscosity of gases at increase of pressure. The account of a cluster component in viscosity allows with sufficient accuracy to describe known baric dependences of viscosity of dense gases.

Key words: the concentration of clusters, diameters and temperature of diluted gases, method of determining the effective diameter of the gas

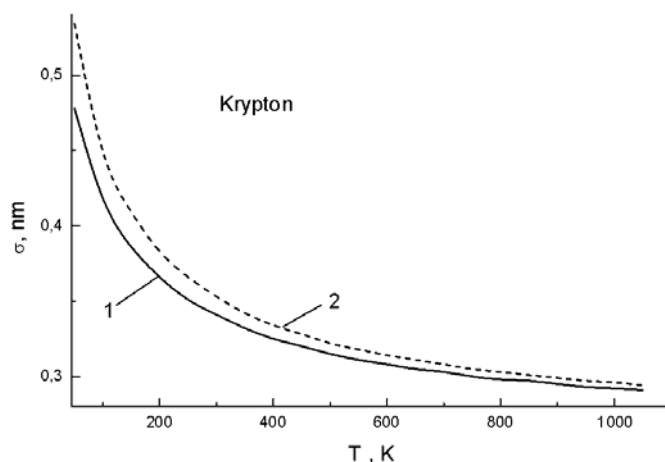
Для расчетов концентраций кластеров, как и других свойств, необходимо иметь сведения об эффективных диаметрах столкновений как функции температуры. Наиболее надежным источником таких данных служат данные по температурной зависимости коэффициента вязкости разреженного газа (газа Больцмана), т.е.–вязкости при условиях, когда он практически не зависит от давления. К настоящему времени такие данные приведены в справочной литературе по теплофизическим свойствам газов [1-12] и в целом ряде статей (например, [8]). В настоящей статье эти данные обработаны методом полиномиальной регрессии, и полученные полиномы затем использованы для расчетов эффективных диаметров. В программе расчетов концентраций кластеров, а через них и других свойств, эффективные диаметры всякий раз рассчитываются по температурной зависимости вязкости, поэтому для примера на рисунке б приведены данные только для

криптона. Расчеты эффективных диаметров, в которых использована температурная зависимость вязкости при атмосферном давлении, приведены на рисунках 1, 2.



1-вычисления по вязкости из [12]; 2-вычисления по вязкости из [8].

Рисунок 1 - Эффективный диаметр столкновений, вычисленный по формуле для коэффициента вязкости газа Больцмана с использованием аппроксимации температурной зависимости вязкости полиномом 4 степени



1-вычисления по вязкости из [12]; 2-вычисления по вязкости из [8].

Рисунок 2-Эффективный диаметр столкновений, вычисленный по формуле для коэффициента вязкости газа Больцмана с использованием аппроксимации температурной зависимости вязкости полиномом 5 степени

Как видно из рисунков 7, 8, эффективный диаметр столкновений уменьшается с увеличением температуры, что согласуется с общими представлениями о процессах взаимодействия молекул (подобная зависимость наблюдается для всех газов). При увеличении температуры растет скорость их относительного сближения при столкновении, поэтому молекулы сближаются на меньшее расстояние по сравнению со случаем столкновений при более низкой температуре. В терминах энергии взаимодействия это объясняется тем, что на малых расстояниях потенциальная энергия взаимодействия отрицательная (между молекулами действуют силы отталкивания), а положительная кинетическая энергия больше при высоких температурах, поэтому при высоких температурах молекулы при столкновении сближаются на меньшее расстояние, которое и принято рассматривать в виде эффективного диаметра столкновений. В таких потенциалах, как потенциал Леннарда-Джонса или ему подобных, это отражается аналитическим видом потенциала, но после усреднений по всем возможным столкновениям удобно столкновения описывать эффективным диаметром столкновений, который зависит от температуры. Температурную зависимость эффективного диаметра столкновений удобно выражать степенной формулой, которая является следствием степенной зависимости коэффициентов переноса от температуры.

Принято считать, что наиболее надежные данные о параметрах столкновений молекул можно получать из температурной зависимости коэффициента вязкости разреженного газа, так как такие данные сравнительно просто измерять в достаточно широком интервале температуры и для них существуют достаточно надежные данные [13].

Формула кинетической теории для вязкости разреженного газа (для газа Больцмана) дает следующую формулу для расчетов эффективных диаметров столкновений молекул:

$$\sigma_{11}(T) = \sqrt{\frac{0.2344}{\eta(T)} \frac{\sqrt{m_1 k T}}{\pi}}, \quad (1)$$

где $\sigma_{11}(T)$ - эффективный диаметр столкновений как функция температуры,

$\eta(T)$ - коэффициент вязкости как функция температуры,

m_1 - масса молекулы.

Использование температурной зависимости коэффициента вязкости позволяет по этой формуле определять эффективный диаметр при любой температуре из интервала, в котором были определены коэффициенты вязкости. Такой способ применен в созданной нами схеме для расчетов концентраций кластеров, а через них и фактора сжимаемости и коэффициента вязкости кластерных газов при повышенных давлениях.

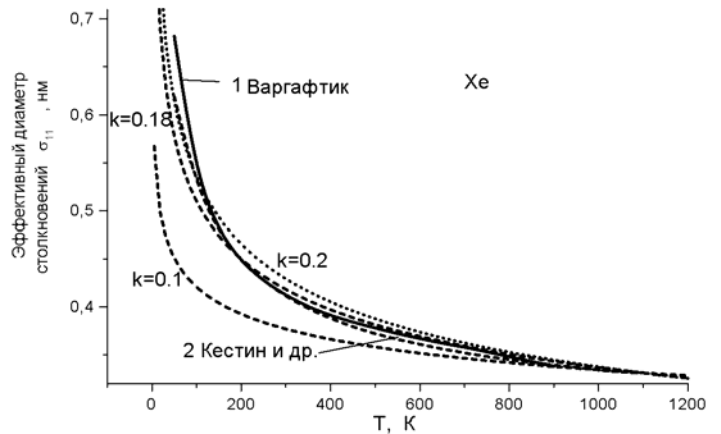
В вычислительной практике часто используется описание температурной зависимости коэффициентов переноса в виде степенной формулы [7]. Такая форма дает следующую зависимость эффективного диаметра от температуры:

$$\sigma(T) = \sigma(T_1) \left(\frac{T_1}{T} \right)^k, \quad (2)$$

$$\text{где } k = \frac{w-0.5}{2},$$

w - показатель степени в температурной зависимости вязкости разреженного газа (для большинства газов он равен 0,7).

На рисунке 9 приведены результаты вычислений температурной зависимости эффективного диаметра столкновений молекул ксенона, полученной по различным схемам расчетов.



1-вычисления по вязкости из [12]; 2-вычисления по вязкости из [8].

Рисунок 3-Эффективный диаметр столкновений, вычисленный по формуле для коэффициента вязкости газа Больцмана с использованием аппроксимации температурной зависимости вязкости полиномом 5 степени

Из этих данных видно, что эти данные хорошо согласуются в области высоких температур и расходятся при низких температурах, что можно отнести к влияниям кластеров на вязкость при низких температурах.

Для коэффициентов диффузии обычно температурная зависимость выражается в виде линейной зависимости логарифма от коэффициента диффузии [1-12]. Такая зависимость позволяет представить температурную зависимость эффективного диаметра столкновений в следующем виде:

$$\sigma_{\alpha\alpha}(T_2) = \sigma_{\alpha\alpha}(T_1) \left(\frac{T_1}{T_2} \right)^{\frac{u-1.5}{2}}. \quad (3)$$

Для нахождения u можно использовать найденную в экспериментах температурную зависимость коэффициента самодиффузии, так как он является предельным значением истинного коэффи-

циента диффузии $\left(D_{\alpha\alpha} = \lim_{n\alpha \rightarrow n} D_{\alpha} \right)$. Тогда показатель степени u определяется так:

$$u = \frac{\partial(\ln D_{\alpha\alpha})_p}{\partial \ln T}. \quad (4)$$

Если температурная зависимость представляется в виде [38], $\left(\frac{D(Y)}{D(T_0)} \right) = \left(\frac{T}{T_0} \right)^u$, то по формуле (2.15) легко определяется эффективный диаметр при любой температуре. Обычно в качестве опорной температуры принимается $T_0 = 273$ К, а за $D(T_0)$ принимается коэффициент диффузии при этой температуре. Такая схема расчета применена в данной диссертации для вязкости.

Параметры, характеризующие столкновения молекул, входят во все формулы как для расчетов равновесных, так и неравновесных свойств, и точность таких расчетов во многом определяется точностью данных для этих параметров. Формулы кинетической теории разреженных газов позволяют проводить расчеты таких параметров по коэффициентам переноса или по вириальным коэффициентам. Наиболее распространенным потенциалом взаимодействия молекул является модельный потенциал Леннарда-Джонса [11, 16],

$$\varphi(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (5)$$

параметры для которого (ε - глубина потенциальной ямы и σ - расстояние, на котором потенциальная энергия равна нулю) рассчитаны и приведены для многих газов и паров в монографии [13]. Причем, оказалось, что параметры, найденные из вязкости и из второго вириального коэффициента не совпадают. К настоящему времени не существует однозначного отношения к таким параметрам и нельзя отдать предпочтение какому-нибудь из них. Применительно к описанию взаимодействий кластеров хорошо разработанные модельные потенциалы плохо пригодны в связи с тем, что в них основная часть - силы притяжения - обосновываются дисперсионными силами. Природа таких сил заключается в том, что в электрически нейтральных до взаимодействия молекулах при сближении мгновенные дипольные моменты хаотического происхождения наводят дипольный момент на соседней молекуле, что и приводит к их взаимному притяжению. Молекулы, находящиеся в кластерах, уже не могут рассматриваться

как свободные нейтральные частицы, поэтому изменяется и характер взаимодействия молекул, находящихся в кластерах. В связи с этим в настоящей диссертации в основном используется модель твердых сфер с эффективными диаметрами, зависящими от температуры. Температурная зависимость эффективных диаметров может быть найдена из температурной зависимости коэффициентов переноса или вириальных коэффициентов.

Существующая неоднозначность в литературных данных по температурной зависимости вязкости приводит и к определенной неоднозначности найденных эффективных диаметров столкновений. Для примера на рисунках 7-9 приведены эффективные диаметры как функции температуры, полученные из вязкости, приведенных в различных доступных источниках. Аналогичная картина наблюдается и для других газов.

Литература

1. Ташимбетова А.Т., Тимошенко А.Т. Расчеты коэффициентов вязкости смесей газов // Тезисы докл. 56 Республиканская научная конференция молодых учёных, магистрантов и студентов «Молодежь и наука в третьем тысячелетии». - Алматы, 2002. - С. 20.
2. Ташимбетова А.Т.. Коэффициенты диффузии некоторых многокомпонентных смесей газов // Тезисы докл. 56-ая Республиканская научная конференция молодых учёных, магистрантов и студентов «Молодежь и наука в третьем тысячелетии», 22-23 апреля 2002 г. Тезисы докладов, Алматы: КазНУ, 2002. С. 25.
3. Ташимбетова А.Т., Савина Е.В. Расчет температурной зависимости эффективных диаметров столкновений из вязкости газов // Тезисы докл. 57-ая Республиканская научная конференция молодых ученых, магистрантов и студентов «Образование, наука и молодежь: взгляд в будущее Казахстана», посвященная 70-летию КазНУ им. аль-Фараби. - Алматы, 2003. - С. 103.
4. Ташимбетова А.Т. Влияние кластеров на вязкость умеренно плотных газов // Вестник КазНУ. Серия физическая. - 2003. - №2 (15). - С. 123-128.
5. Айткожаев А.З., Ташимбетова А.Т. Влияние кластеров на вязкость газов // Тезисы докл. 3-й Международной научной конф. «Современные достижения физики и фундаментальное физическое образование». - Алматы, 2003. - С. 57.
6. Ташимбетова А.Т., Морщинина А.Ю. Влияние кластеров на барическую зависимость вязкости // Материалы Всероссийской научной конференции студентов физиков. (ВНКСФ-12). Новосибирск, 2006. - С.332-333.
7. Курлапов Л.И., Ташимбетова А. Т. Влияние кластеров на барическую зависимость вязкости газов // Вестник КазНУ. Серия физическая. - 2007. - №1(23) - С. 86-91.
8. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. М.: Мир. 1976. -556 с.
9. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. - М: ИЛ, 1961. -930 с.

Рецензент к.т.н. Тыныбеков Азамат