

Жылуфизика және техникалық физика
кафедрасы

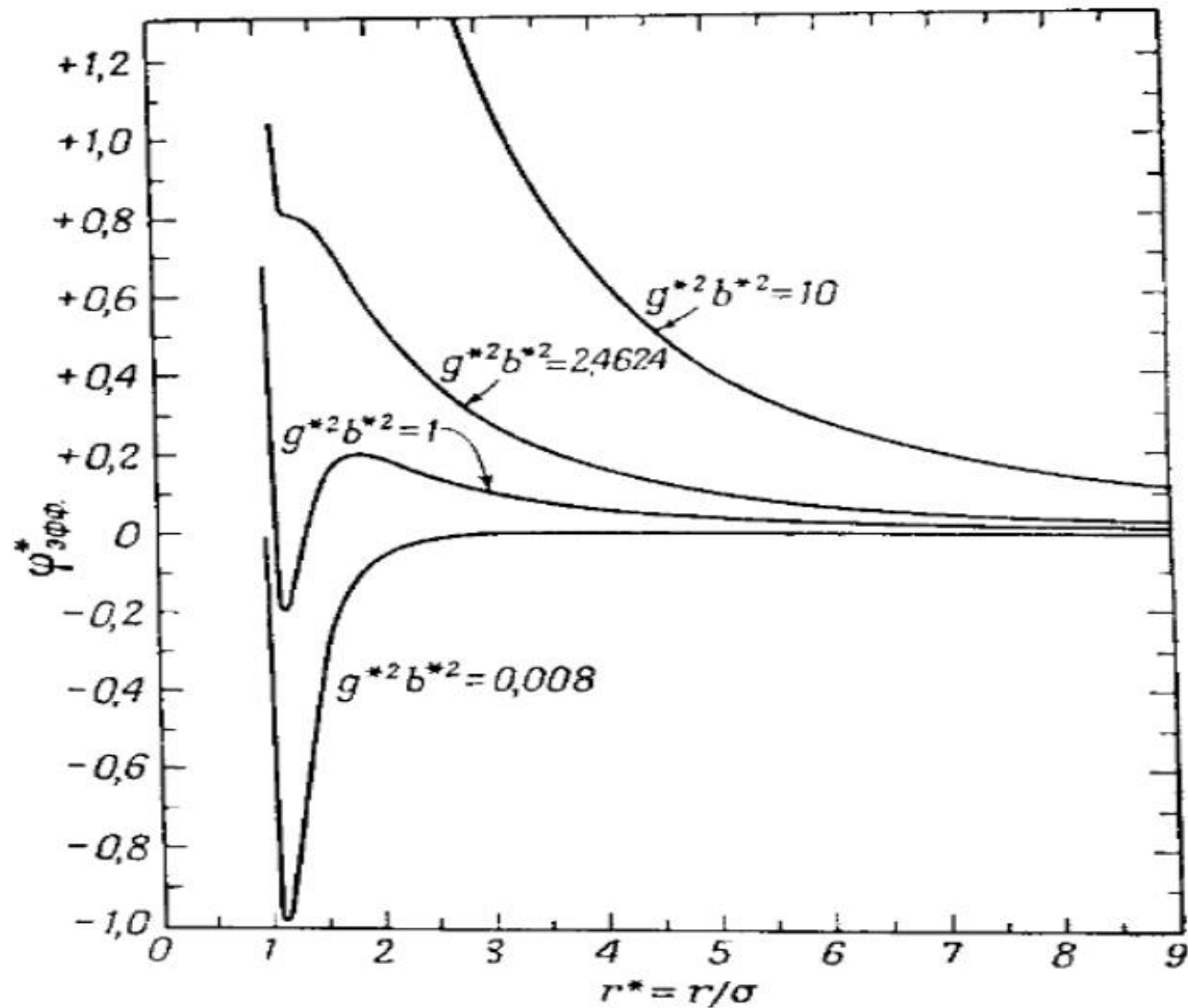
**КӨПКОМПОНЕНТТІК ГАЗ
КОСПАСЫНДАҒЫ ДИФФУЗИЯЛЫҚ
ТҰРАКСЫЗДЫҚ**

Дәріскер:
Асембаева М.К.



Тартылыс күштері мен центрден тепкіш күші теңескенде эффективтік потенциалдық энергиясының r^* -ге тәуелді қисығындағы максимумы мен минимумы $(g^*b^*)^2 = 2,4624$ болғанда бір нүктеде қиылысады, сол критикалық (ирең) нүктесі болады, бұл кезде соқтығысатын екі молекуланың келтірілген кинетикалық энергиясы 0,8. Критикалық мәннен жоғары эффективтік потенциалдық энергиясы үлкен қашықтарда r^* -дың монотонды кемімелі функциясы. Соқтығысу сипаттарына осы эффективтік потенциалдық энергиясының g^*b^* көбейтіндісіне тәуелділігі әсер етеді.

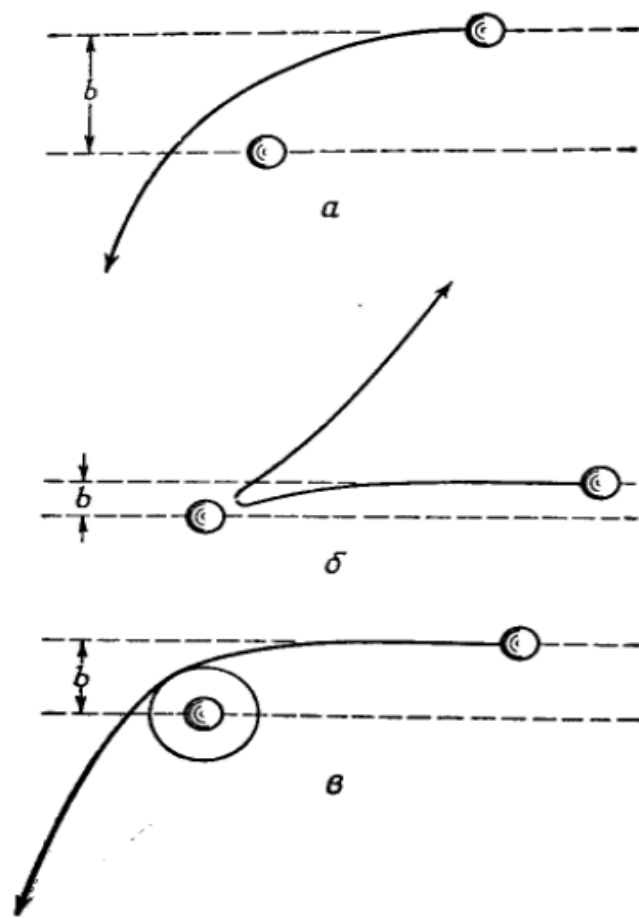
Егер соқтығысатын екі молекуланың бастапқы келтірілген кинетикалық энергиясы $g^{*2} < 0,8$ болса, онда $(g^*b^*)^2$ мәніне тәуелді соқтығысудың бірнеше типтері болуы мүмкін. Мысалы, $g^{*2} \approx 0,2$ болса, онда: а) егер $(g^*b^*)^2 = 10$, молекулалар бірте-бірте бір-бірінен ауытқып кетеді. Мұндай соқтығысуды жанама деуге болады, тебілу күшінің әсері елеусіз аз, өте маңызды тартылыс күштері; б) егер $(g^*b^*)^2 = 0,008$, молекулалар тіке (бетпе-бет) соқтығысады, алыс қашықта тартылыс күштері, жақында – тебу күштері әсер етеді; в) егер соқтыққан молекулалар эффективтік потенциалдық энергиясының қисығының максимумынан өте алмаса, онда молекулалар бір-бірінің төңірегінде айнала бастайды, демек квазибайланысты (кластерлік) күй пайда болады.



1.7-сурет. Леннард-Джонс (6-12) потенциалы үшін келтірілген $\phi_{\text{эфф.}}^*(r^*)$ эффективтік потенциалдық энергиясының r^* тәуелділігі

Тартылыс күштері мен центрден тепкіш күші теңескенде эффективтік потенциалдық энергиясының r^* -ге тәуелді қисығындағы максимумы мен минимумы $(g^*b^*)^2 = 2,4624$ болғанда бір нүктеде қиылысады, сол критикалық (ирең) нүктесі болады, бұл кезде соқтығысатын екі молекуланың келтірілген кинетикалық энергиясы 0,8. Критикалық мәннен жоғары эффективтік потенциалдық энергиясы үлкен қашықтарда r^* -дың монотонды кемімелі функциясы. Соқтығысу сипаттарына осы эффективтік потенциалдық энергиясының g^*b^* көбейтіндісіне тәуелділігі әсер етеді.

Егер соқтығысатын екі молекуланың бастапқы келтірілген кинетикалық энергиясы $g^{*2} < 0,8$ болса, онда $(g^*b^*)^2$ мәніне тәуелді соқтығысудың бірнеше типтері болуы мүмкін. Мысалы, $g^{*2} \approx 0,2$ болса, онда: а) егер $(g^*b^*)^2 = 10$, молекулалар бірте-бірте бір-бірінен ауытқып кетеді. Мұндай соқтығысуды жанама деуге болады, тебілу күшінің әсері елеусіз аз, өте маңызды тартылыс күштері; б) егер $(g^*b^*)^2 = 0,008$, молекулалар тіке (бетпе-бет) соқтығысады, алыс қашықта тартылыс күштері, жақында – тебу күштері әсер етеді; в) егер соқтыққан молекулалар эффективтік потенциалдық энергиясының қисығының максимумынан өте алмаса, онда молекулалар бір-бірінің төңірегінде айнала бастайды, демек квазибайланысты (кластерлік) күй пайда болады.



1.8-сурет. Молекулалардың әртүрлі соқтығысу типтері Леннард-Джонс потенциалы бойынша
 а) молекулалардың бірте-бірте бір-бірінен ауытқуы; б) молекулалар тіке (бетпе-бет) соқтығысуы; в) квазибайланысты молекулалардың (кластерлер) пайда болуы

Төменгі температураларда газдың тығыздығы немесе қысымы жоғары болғанда, фазалық ауысу қисығына жақындағанда тасымалдау коэффициенттеріне квазибайланысты молекулалардың әсері байқалады [1, 27-33].

$\Omega^{(l,s)*}$ - келтірілген соқтығысу интегралының Леннард-Джонс потенциалы үшін температураға тәуелділігі суретте берілген [1].

Айта кету керек, кинетикалық теорияның айнымалы шамалары жалпы талқылауларда өлшемсіз параметрлер арқылы өрнектеледі. Олар потенциалдық функциялардың, демек молекулааралық әрекеттесу потенциалының параметрлерінің комбинациясына айнымалыларды бөлу арқылы өлшемділіксіз түрге келтіріледі және келтірілген деп аталады. Теорияда келесі өлшемділіксіз (келтірілген) параметрлер қолданылады:

$$g^{*2} = \frac{1}{2} m_{ij} g^2 / \varepsilon \quad \text{салыстырмалы қозғалыстың келтірілген (өлшемділіксіз)}$$

кинетикалық энергиясы, ал g соқтыққан бөлшектердің салыстырмалы жылдамдығының шамасы;

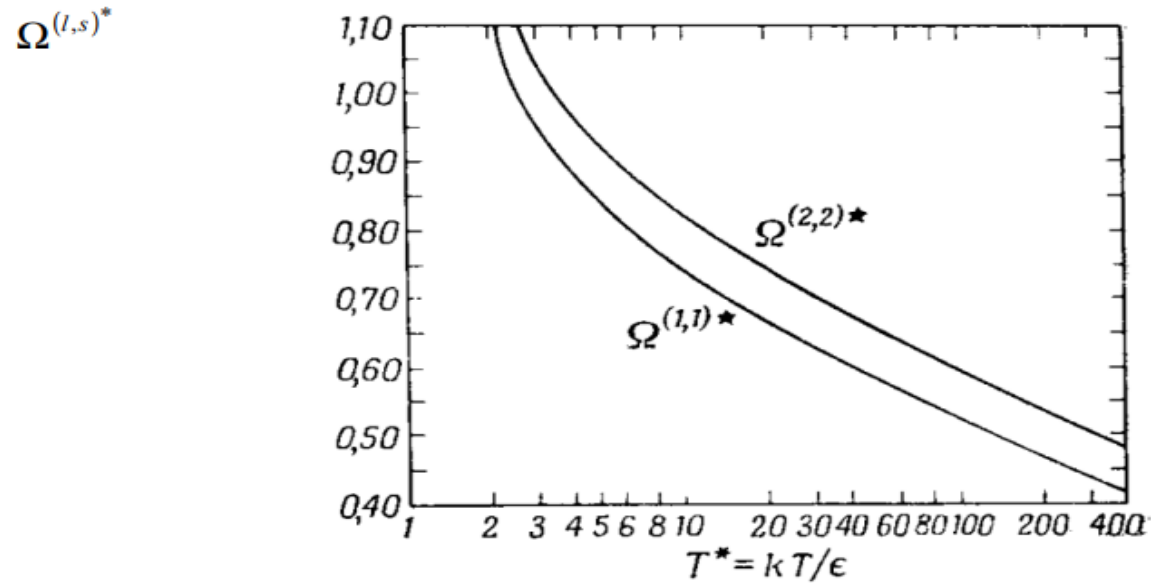
$$T^* = kT / \varepsilon \quad \text{келтірілген температура;}$$

$r^* = \frac{r}{\sigma}$ - келтірілген молекулааралық қашықтық;

$\varphi^* = \left(\frac{\varphi}{\varepsilon} \right)$ - молекулааралық өзара әрекеттесуінің келтірілген потенциалдық

энергиясы;

$b^* = \frac{b}{\sigma}$ - келтірілген көздеу қашықтығы.



1.9 сурет. $\Omega^{(l,s)*}$ - келтірілген соқтығысу интегралының Леннард-Джонс потенциалы үшін температураға тәуелділігі

Төменгі температураларда $\Omega^{(l,s)}$ - интегралдарына басты үлесті қосатын g^* -ның кіші мәндері. Бұл жағдайда $\Omega^{(l,s)}$ - интегралдары және тасымалдау коэффициенттері тартылыс күштері арқылы анықталады.

Өте маңызды сипаттама газ қоспасының тығыздығы болады. Газ қоспасының тығыздығы өскен сайын Больцман теңдеуінің негізіндегі долбарлар (жорамалдар) дұрыс орындалмайды. Өйткені тығыздық өскен сайын көпбөлшектік соқтығысулар ықтималдығы артады және соқтығысу ұғымының мағынасы да өзгереді, себебі кез келген молекуланың қозғалысы жақындағы молекулалардың потенциалдық өрісімен қоздырылады. Практикада негізінде өзара диффузия коэффициенттерінің температуралық тәуелділігі тұрақты қысымда зерттеледі. Чепмен-Энског теориясынан қатты сферадан тұратын газдар үшін (1.16) формуланы келесі түрде жазуға болады:

$$D_{12} = D_{12}^0 \left(\frac{T}{T^0} \right)^m \frac{\rho^0}{\rho}. \quad (1.33)$$

$$\left(\frac{\partial \ln D_{12}}{\partial \ln T} \right)_p = m. \quad (1.34)$$

Идеал газ үшін $p = nkT$ (мұндағы n - газдың сандық тығыздығы) күй теңдеуі арқылы (1.34)-ді былай жазуға болады:

$$\left(\frac{\partial \ln D_{12}}{\partial \ln T} \right)_p = n + 1.$$

Бұл көрсеткіштің мәні 1,5 пен 2.0 аралығында жатады. Мұндай қорытынды (1.28) формуладан шығады, егер $\Omega^{(l,s)}$ соқтығысу интегралдарының температураға тәуелділігін ескеретін болса. Шынында, сиретілген газ үшін $p = const$ кезінде:

$$D_{12} \sim T^{3/2} / \Omega^{(1,1)*}(T^*). \quad (1.35)$$

Жоғары қысымдарда және төменгі температурада фазалық ауысу сызығына жақындағанда D_{12} -ның температуралық тәуелділігінің өзгеруі күтпеген жағдай емес. Өйткені өзара диффузия коэффициентін әр түрлі температурада қысым тұрақтыда сипаттағанда қоспаның тығыздығы температураға сызықты тәуелділікте деп қарастырады, ал бұл тек идеал газдарда орындалуы мүмкін.

$$Y = 1 + 0,6250 \frac{b_0}{\tilde{V}} + 0,2869 \left(\frac{b_0}{\tilde{V}} \right)^2 + 0,115 \left(\frac{b_0}{\tilde{V}} \right)^3 \dots \quad (1.36)$$

Соқтығыста тасымалдану тығыз газдарда – тасымалдау процесінің басты механизмі, оның артықшылығы жиындық соқтығысулардың ықтималдығын ескермеуге болады. Y шамасы молекулалардың арақашықтығының функциясы болып келеді. Ол молекулалардың жылдамдығынан тәуелсіз және сиретілген газ үшін бірге тең, ал тығыздық артқан кезде өсіп, шексіздікке ұмтылады. Энског тек таза газдар үшін тасымалдау коэффициенттерін анықтаған.

Энскогтың теориясын нақты газдарға қолдануға болады. Энскогтың болжауы бойынша тығыз газдың D тасымалдау коэффициенттерінің олардың қысымы нөл болғандағы D^0 мәндеріне қатысы және \tilde{V} келтірілген көлемге көбейтіндісі өлшемсіз түрде былай жазылады:

$$\frac{D\tilde{V}}{D^0 b_0} = \frac{1}{y}, \quad (1.37)$$

$$y = \frac{b_0}{\tilde{V}} Y = \frac{2}{3} \pi N_0 \sigma^3 Y, \quad (1.38)$$

мұндағы $B = b_0 = \frac{2}{3} \pi N_0 \sigma^3$ - екінші вириалдық коэффициент, \tilde{V} - мольдік көлем, N_0 - Авогадро саны.

Энскогтың теориясын қатты сфералардан тұратын газдардың бинарлық қоспасы үшін жалпылаған Торн [1-3]. Энскогтың тығыз газдар үшін теориясы бинарлық қоспаның өзара диффузия коэффициентін оның тығыздығы аз (сиретілген газ) газдың мәнімен қарапайым түрде байланыстырады:

$$D_{12} = \frac{[D_{12}^0]}{Y_{12}}, \quad (1.41)$$

мұндағы $[D_{12}^0]$ - сиретілген газдың кинетикалық теориясына негізделіп анықталған, өзара диффузия коэффициенті. Оны есептегенде газдың температурасы мен қысымы тығыз газдың температурасы мен қысымына тең деп алынады; Y_{12} - молекуланың соқтығысу жиілігі, қатты сфералар үшін бөлшектердің $n(\vec{r}, t)$ сандық тығыздығына және молекулалардың σ_1 мен σ_2 диаметрлеріне тәуелді Торн түзетуі:

$$Y_{12} = 1 + \frac{\sigma_1}{\sigma_{12}} n_1 \sigma_1^3 \left(8 - 3 \frac{\sigma_1}{\sigma_{12}} \right) + \frac{\pi}{12} n_2 \sigma_2^3 \left(8 - 3 \frac{\sigma_2}{\sigma_{12}} \right) + \dots, \quad (1.42)$$

Торнның түзетулер енгізген Энскогтың теориясы тығыз газдардың тұтқырлығы үшін қанағаттандырарлық сәйкестік береді де, ал төменгі температуралар аймағындағы диффузия үшін ауытқу едәуір болады. Энског-Торнның өрнегіне зерттеушілер әртүрлі өзгертулер енгізуде, бірақ олар экспериментпен жақсы үйлесім таппайды.