УДК 517

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ТРОЙНЫХ СТОЛКНОВЕНИЙ МОЛЕКУЛ

Хлопков Ю.И.[1, 2], Зея Мьо Мьинт[2], Хлопков А.Ю.[2]

[1]*ФГУП ЦАГИ «Центральный Аэрогидродинамический Институт», Жуковский, Россия*
[2]*ФГОУ ВПО «Московский физико-технический институт (государственный университет)», Долгопрудный, Россия*

Работа выполнена при поддержке РНФ (Проект № 14-11-00709).

АННОТАЦИЯ

Понятие об упругих столкновениях играет важную роль в физике, поскольку со столкновениями часто приходится иметь дело в физическом эксперименте в области атомных явлений, и обычные столкновения можно часто с достаточной степенью точности считать упругими. Состояние газа определяется взаимодействием молекул между собой и с границами твердыми или жидкими телами. При взаимодействии частиц могут происходить различные процессы. Процесс столкновения сводится к изменению свойств частиц в результате взаимодействия. Законы сохранения позволяют достаточно просто устанавливать соотношения между различными физическими величинами при столкновении частиц. В данной работе рассматривается взаимодействие молекул с потенциалами для парных и тройных столкновения упругих молекул.

ВВЕДЕНИЕ

Состояние газа определяется взаимодействием молекул между собой и с границами твердыми или жидкими телами. Понятие об упругих столкновениях играет важную роль в физике, поскольку со столкновениями часто приходится иметь дело в физическом эксперименте в области атомных явлений. При взаимодействии частиц могут происходить различные процессы. Процесс столкновения сводится к изменению свойств частиц в результате взаимодействия. Законы сохранения позволяют достаточно просто устанавливать соотношения между различными физическими величинами при столкновении частиц.

В данной работе рассматривается кинетическое уравнение взаимодействие молекул газа для парных и тройных столкновений упругих молекул.

Свойства газа с ощутимым влиянием тройных столкновений будут отличаться от обычных свойств из-за столкновения молекул между собой и с поверхностью твердого тела. Вероятность тройного столкновения мала по сравнению с парным столкновением.

МОДЕЛИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МОЛЕКУЛ ГАЗА

Молекулы или атомы состоят из положительных и отрицательных зарядов (ядер и электронов) [1]. Обозначим через r_{A}^{a} и r_{A}^{e} радиус-векторы ядер и электронов молекулы А и через r_{B}^{a} и r_{B}^{e} соответствующие величины для молекулы В. Тогда Потенциалом взаимодействия молекул принято называть величину

$$U_{\mathrm{AB}} = U\left(r_{\mathrm{A}}^{a}, r_{\mathrm{A}}^{e}, r_{\mathrm{B}}^{a}, r_{\mathrm{B}}^{e}\right) - U_{\mathrm{A}}\left(r_{\mathrm{A}}^{a}, r_{\mathrm{A}}^{e}\right) - U_{\mathrm{B}}\left(r_{\mathrm{B}}^{a}, r_{\mathrm{B}}^{e}\right)$$

где $U_{\mathrm{A}}(r_{\mathrm{A}}^{a}, r_{\mathrm{A}}^{e})$ − потенциал взаимного расположения зарядов молекулы А, $U_{\mathrm{B}}(r_{\mathrm{B}}^{a}, r_{\mathrm{B}}^{e})$ − потенциал взаимного расположения зарядов молекулы В. Функция U_{A} и U_{B} равны потенциальной энергии молекул лишь при бесконечном расстоянии между молекулами. Потенциал взаимодействия молекул зависит от взаимного расположения зарядов обеих молекул.

© Хлопков Ю.И., Зея Мьо Мьинт, Хлопков А.Ю.

Силы, действующие между молекулами, разделяют на химические или валентные (силы отталкивания, проявляющиеся на малых расстояниях) и силы притяжения (силы Ван-дер-Ваальса, действующие при больших удалениях молекул друг от друга). Химические или валентные, силы являются определяющими, когда электронные облака молекул перекрываются и имеют квантовомеханическую природу с обменным взаимодействием. Обычно потенциал взаимодействия убывает экспоненциально с расстоянием

$$U_{\text{AB}} = C_1 e^{-c_2 r_{\text{AB}}}$$

где C_1 и C_2 – некоторые постоянные.

Между молекулами возникают силы взаимодействия диполя с диполем, диполя с квадруполем. Сила зависит от ориентации диполей и может быть как силой притяжения, так и отталкивания. Часто энергию взаимодействия молекул усредняют по всем ориентациям. Если газ находится в равновесии, то вероятность обнаружения двух молекул, взаимодействующих с потенциалом U_{AB}, пропорциональна Больцмановскому множителю $e^{-U_{\text{AB}}/kT}$, где T – температура газа и k– постоянная Больцмана. Потенциал равен

$$U_{\text{AB}} = \frac{\int U_{\text{AB}} e^{-U_{\text{AB}}/kT} \sin\theta_{\text{A}} \sin\theta_{\text{B}} d\theta_{\text{A}} d\varphi_{\text{A}} d\theta_{\text{B}} d\varphi_{\text{B}}}{\int e^{-U_{\text{AB}}/kT} \sin\theta_{\text{A}} \sin\theta_{\text{B}} d\theta_{\text{A}} d\varphi_{\text{A}} d\theta_{\text{B}} d\varphi_{\text{B}}}$$

где θ и φ – соответственно полярный и азимутальный углы, определяющие направление оси диполя относительно линии, соединяющей центры молекул. При слабых взаимодействиях, когда величина $\left|U_{\text{AB}} - \overline{U}_{\text{AB}}\right|$ мала по сравнению с kT при всех ориентациях, экспоненциальный член получаем

$$U_{\text{AB}} = \frac{1}{64\pi^6}\int U_{\text{AB}} d\omega - \frac{1}{kT}\left\{\frac{1}{64\pi^4}\int U_{\text{AB}}^2 d\omega - \frac{1}{64\pi^6}\int U_{\text{AB}} d\omega\right\}^2 + \ldots,$$

где

$$d\omega = \sin\theta_{\text{A}} \sin\theta_{\text{B}} d\theta_{\text{A}} d\varphi_{\text{A}} d\theta_{\text{B}} d\varphi_{\text{B}}$$

При диполь-дипольном взаимодействии вероятность ориентаций с притяжением и отталкиванием одинакова, то первый член равен нулю, и осредненный потенциал взаимодействия оказывается убывающим обратно пропорционально шестой степени расстояния ($U_{\text{AB}} \sim 1/r^3_{\text{AB}}$). При взаимодействии двух молекул каждый заряд одной молекулы поляризует другую молекулу, вызывая появление индуцированного диполя.

В принципе квантовомеханический расчет потенциала взаимодействия возможен для любых молекул, практически более или менее точные расчеты взаимодействия проведены лишь для простейших молекул. На практике обычно пользуются эмпирическими и полуэмпирическими законами взаимодействия.

1) Упругие шары

Пусть d – диаметр шара, тогда потенциал взаимодействия двух шаров представляется в виде

$$\left.\begin{aligned} U(r) &= \infty \quad \text{при} \quad r < d, \\ U(r) &= 0 \quad \text{при} \quad r > d. \end{aligned}\right\}$$

Эта модель грубо моделирует лишь короткодействующие силы отталкивания. Широко применяется для качественных рассмотрений, связанных с процессом столкновения молекул, так как для твердых шаров процесс столкновения представляется наиболее наглядно.

2) Центры отталкивания с потенциалом

$$U = \frac{K}{r^{s-1}}$$

Величина (s–1) называют показателем отталкивания. Молекулы, у которых s = 5, принято называть *максвелловскими газоми*. Газ, состоящий таких молекул называют *максвелловским газом*. Ближе к реальным значения s, больше 5. максвелловские молекулы слишком «мягкие», в то время как упругие сферы слишком «жесткие» В Максвелловском газе отсутствует явление термодиффузии.

3) Потенциал Морзе

$$U(r) = \varepsilon\left[e^{-2\beta(r-a)} - 2e^{-\beta(r-a)}\right]$$

где a - положение минимума потенциальной ямы, ε – глубина потенциальной ямы, β – кривизна потенциальной кривой вблизи минимума.

С помощью этих параметров потенциальная кривая может быть удовлетворительно аппроксимирована вблизи минимума. Если $r \to \infty$ потенциал быстро спадает. Потенциал удобен во многих случаях для расчетов.

Для закона взаимодействия рассчитывают из макроскопического эксперимента, можно найти входящие в них неизвестные параметры потенциала взаимодействия. Как известно, для Ван-дер-ваальсовского газа уравнение состояния имеет вид

$$\frac{p\mathbf{V}}{RT} = 1 + \frac{\mathrm{B}_2(T)}{\mathbf{V}} + \frac{\mathrm{B}_3(T)}{\mathbf{V}^2} + \ldots$$

где p, $\mathbf{V}$ и T – давление, удельный объем и температура газа, R– универсальная газовая постоянная и B_2, B_3 и т. д. – второй, третий и т. д. Вириальные коэффициенты. Изменяя температуру газа и замеряя давление, можно найти зависимость вириального коэффициента от температуры.

Законы взаимодействия молекул более усложняются, если при столкновении молекула переходит из одного квантового состояния в другое. Если в процессе столкновения молекула переходит из одного в другое, то в точке перехода необходимо перейти с одной потенциальной кривой на другую. Потенциал взаимодействия зависит от взаимного углового расположения молекул. Простейшую модель несферической молекулы можно представить в виде эллипсоида вращения. Отсутствие сферической симметрии у потенциала взаимодействия существенно усложняет исследование. Иногда можно взаимодействие таких молекул усреднить по углам.

4) Потенциал Леннарда–Джонса

Вообще говоря, на молекулярном уровне необходимо учитывать потенциалы взаимодействия, используя электронно–ядерные представления. Эмпирические потенциальные зависимости отражают тот факт, что на больших расстояниях преобладают силы притяжения, на малых расстояниях – силы отталкивания. Эту особенность наиболее просто отражает модель Леннарда–Джонса. Шестая степень убывания потенциала моделирует элетростатическое диполь-дипольное и дисперсионное притяжение. Двенадцатая степень убывания отталкивающего потенциала выбрана из соображений математического удобства. В то же время она моделирует достаточно жесткое отталкивание

$$U(r) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{d}{r}\right)^{12} - \left(\frac{d}{r}\right)^{6}\right].$$

При $r = d$ потенциал равен нулю. Величина е характеризует глубину потенциальной ямы порядка одного электрон вольта

КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ СТОЛКНОВЕНИЯ МОЛЕКУЛ ГАЗА

Известное интегродифферециальное кинетическое уравнение Больцмана для парных столкновения имеет в виде [2-4]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \overline{\xi}\nabla f = St\, f = \int\left(f'\, f_1' - f\, f_1\right)\overline{\mathrm{g}}\, b\, db\, d\varepsilon\, d\overline{\xi}_1$$

$f\,(t, x, y, z, \xi_x, \xi_y, \xi_z)$ – функция распределения молекул по времени, координатам и скоростям, f', f_1' – функции распределения, соответствующие скоростям молекул после столкновения ξ' и ξ_1', g – относительные скорости молекул при парных столкновениях $\overline{\mathrm{g}} = \overline{\xi} - \overline{\xi}_1 = \overline{\xi}' - \overline{\xi}_1'$, b, ε – прицельное расстояние и азимутальный угол при столкновениях частиц.

Рассмотрим определение скорости парных упругих столкновениях молекул. Столкновение молекул в совершенном газе являются парными, т. е. столкновении участвуют только две молекулы. Упругое столкновение определяется как столкновение, в котором не происходит обмена между поступательной и внутренней энергиями. Скорости двух молекул до столкновения в типичном парном столкновении можно обозначить через ξ_1 и ξ_2, а после столкновения ξ_1' и ξ_2'.

В процессе столкновении должны сохраняться массы, импульс, энергии и момент инерции и означает, что

$$m_1\overline{\xi}_1 + m_2\overline{\xi}_2 = m_1\overline{\xi}_1' + m_2\overline{\xi}_2',$$

$$m_1\overline{\xi}_1^{\,2} + m_2\overline{\xi}_2^{\,2} = m_1\overline{\xi}_1'^{2} + m_2\overline{\xi}_2'^{2},$$

$$\frac{m_1\overline{\xi}_1^{\,2}}{2} + \frac{m_2\overline{\xi}_2^{\,2}}{2} = \frac{m_1\overline{\xi}_1'^{2}}{2} + \frac{m_2\overline{\xi}_2'^{2}}{2},$$

$$m_1\overline{\xi}_1 \times \overline{r}_1 + m_2\overline{\xi}_2 \times \overline{r}_2 = m_1\overline{\xi}_1' \times \overline{r}_1 + m_2\overline{\xi}_2' \times \overline{r}_2,$$

здесь m_1, m_2 – массы двух молекул. Значения относительной скорости между молекулами до и после столкновения можно определить так:

$$\overline{\mathrm{g}} = \overline{\xi}_1 - \overline{\xi}_2, \quad \overline{\mathrm{g}}' = \overline{\xi}_1' - \overline{\xi}_2'.$$

уравнения можно разрешить относительно ξ_1 и ξ_2, скорости до столкновений могут быть выражены в виде

$$\overline{\xi}_1 = \overline{\xi}_m + \frac{m_2}{m_1 + m_2}\mathrm{g}, \quad \overline{\xi}_2 = \overline{\xi}_m - \frac{m_1}{m_1 + m_2}\mathrm{g},$$

где скорости центр масса

$$\overline{\xi}_m = \frac{m_1\overline{\xi}_1 + m_2\overline{\xi}_2}{m_1 + m_2},$$

Скорости до столкновения относительно центра масс ξ_1–ξ_m и ξ_2–ξ_m показывают, что эти скорости параллельны в системе центра масс, и если молекулы являются точечными центра-

ми сил, то сила между ними остается в плоскости, содержащей эти скорости. Столкновение, следовательно, происходит в плоскости, проходящей через начало системы центра масс. Так и скорости молекул после столкновении можно написать

$$\bar{\xi}_1' = \bar{\xi}_1 + \bar{n}(\bar{n}\,\bar{g}),\quad \bar{\xi}_2' = \bar{\xi}_2 - \bar{n}(\bar{n}\,\bar{g}),\quad g^2 = \left|\bar{\xi}_1 - \bar{\xi}_2\right| = g'^2.$$

где n – случайный единичный вектор

$n_x = \sin\psi\cos\varphi$, $\quad 0 \le \varphi \le 2\pi$.

$n_y = \sin\psi\sin\varphi$, $\quad 0 \le \psi \le \pi/2$.

$n_z = \cos\varphi$.

Следуя формализму Гиббса, рассматривают не одну систему, ансамбль систем в $6N$ мерном Г-пространстве, распределённых в соответствии с N – частичной функцией распределения $f\left(t,\bar{r}_1,\bar{r}_2,...,\bar{r}_N,\bar{v}_1,\bar{v}_2,...,\bar{v}_N\right) = f_N$, имеющей смысл вероятности нахождения системы в момент времени t в точке $\bar{r}_1,\bar{r}_2,...,\bar{r}_N,\bar{v}_1,\bar{v}_2,...,\bar{v}_N$ в окрестности $d\bar{r}_1,...,d\bar{r}_N,d\bar{v}_1,...,d\bar{v}_N$.

$$dW = f_N d\bar{r}_1..d\bar{r}_N d\bar{v}_1...d\bar{v}_N$$

Подобный ансамбль описывается известным уравнением *Лиувилля*:

$$\frac{\partial f_N}{\partial t} + \sum_{i=1}^{N} v_i \frac{\partial f_N}{\partial r_i} + \sum_{i\ne j}^{N}\sum_{i=1}^{N} \frac{F_{ij}}{m}\frac{\partial f_N}{\partial v_i} = 0,$$

$$F_{ij} = -\nabla U_{ij}.$$

И вот с этого момента уравнение *Лиувилля* и все последующие кинетические уравнение, следующие из цепочки *Боголюбова*, включая последнее её звено – уравнение *Больцмана*, имеют вероятностную природу. И хотя уравнение проще системы уравнения эволюции, оно учитывает N частичные столкновения молекул и также чрезвычайно сложно для практического анализа. Переход на менее детальный уровень описания связан с дальнейшим огрублением описания системы с помощью s– частичных функций распределения $f_s = \int f_N d\bar{r}_{s+1}...d\bar{r}_N d\bar{v}_{s+1}...d\bar{v}_N$, определяющих вероятность одновременного обнаружения s частиц независимо от состояния остальных N-s частиц.

Следуя идеям *Боголюбова*, получают цепочку зацепляющихся уравнений:

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} + \sum_{i=1}^{s} v_i \frac{\partial f_s}{\partial r_i} + \sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{s} \frac{F_{ij}}{m}\frac{\partial f_s}{\partial v_i} = -\sum_{i=1}^{s}(N-s)\frac{\partial}{\partial v_i}\int \frac{F_{ij}}{m} f_{s+1} dr_{s+1} dv_{s+1}$$

для двойных столкновений можно написать в виде

$$\frac{\partial f_2}{\partial t} + \sum_{i=1}^{2} v_i \frac{\partial f_2}{\partial r_i} + \sum_{i=1}^{2}\sum_{j=1}^{2} \frac{F_{ij}}{m}\frac{\partial f_2}{\partial v_i} = -\sum_{i=1}^{2}(N-2)\frac{\partial}{\partial v_i}\int \frac{F_{ij}}{m} f_{2+1} dr_{2+1} dv_{2+1}$$

и для тройных

$$\frac{\partial f_3}{\partial t} + \sum_{i=1}^{3} v_i \frac{\partial f_3}{\partial r_i} + \sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3} \frac{F_{ij}}{m}\frac{\partial f_3}{\partial v_i} = -\sum_{i=1}^{3}(N-3)\frac{\partial}{\partial v_i}\int \frac{F_{ij}}{m} f_{3+1} dr_{3+1} dv_{3+1}$$

Вплоть до одночастичной функции распределения $f_1 = f(t,\bar{r},\bar{\xi})$ газа Больцмана с учётом лишь парных столкновений:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \bar{\xi}\frac{\partial f}{\partial \bar{r}} + \frac{F_{12}}{m}\frac{\partial f}{\partial \bar{\xi}} = -\frac{\partial}{\partial \bar{\xi}}\int \frac{F_{12}}{m} f_2 d\bar{r}_1 d\bar{\xi}_1.$$

Следуя *Больцману*, будем считать молекулы сферически симметричными, и принимая гипотезу молекулярного хаоса $f_2(t,\bar{r},\bar{v}_1,\bar{v}_2) = f_1(t,\bar{r},\bar{v}_1) f_1(t,\bar{r},\bar{v}_2)$, и приходим к уравнению Больцману.

КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ТРОЙНЫХ СТОЛКНОВЕНИЙ

С учетом статистической независимости частиц перед столкновением решение уравнения есть [5]

$$f_3(t,\tau_1,\tau_2,\tau_3) = f_1(t_0,\tau_{10}) f_1(t_0,\tau_{20}) f_1(t_0,\tau_{30})$$

где $\tau_{a0} = \tau_{a0}(t, t_0, \tau_1, \tau_2, \tau_3)$ - значения координат и импульсов, которые частиц должны иметь в момент t_0 для того, чтобы к моменту t попасть в заданные точки τ_1, τ_2, τ_3 фазового пространства.

Теперь перейдя от функций f_1 к функциям $f = Nf_1$, найдем кинетическое уравнение в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \bar{\xi}\nabla f = St_2 f + St_3 f$$

где

$$St_2 f(t,\tau_1) = \int \frac{\partial F_{12}}{m}\frac{\partial}{\partial \xi}\left\{S_{12} f(t,\tau_1) f(t,\tau_2)\right\} d\tau_2,$$

$$St_3 f(t,\tau_1) = \frac{1}{N}\int \frac{F_{12}}{m}\frac{\partial}{\partial \xi}\left\{R_{123} f(t,\tau_1) f(t,\tau_2) f(t,\tau_3)\right\} d\tau_2 d\tau_3$$

Первый из этих интегралов есть интеграл двойных, а второй тройных столкновений. Здесь S_{12} и R_{123} – некоторые операторы. Рассмотрим несколько процессов столкновений, учитываемых интегралом. Прежде всего, оператор R_{123} обращается в нуль, если хотя бы одна частиц не взаимодействует с остальными. В число процессов, для которых $R_{123} \ne 0$, входят не только тройные столкновения, но и совокупности нескольких

двойных. Посмотрим несколькие виды столкновения.

На рис 1а изображен, что три частицы одновременно вступают в «сферу взаимодействия». Но оператор R_{123} отличен от нуля также и для таких процессов «тройных взаимодействий», которые сводятся к трем последовательным двойным столкновениям, причем одна из пар частиц сталкивается между собой дважды, такого процесса изображен на рис. 1б. Более того, оператором R_{123} учитываются также и случаи, когда одно (или более) из трех столкновений является «воображаемым», т. е. возникающим, лишь если не учитывать влияния на траекторию частиц какого-либо из реальных столкновений, который изображен на рис. 1в.

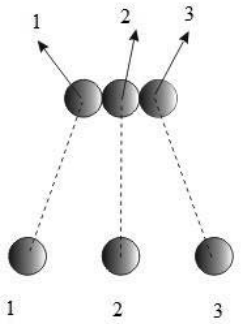

Рис.1(а) Основные траектории частиц тройных столкновений молекул.

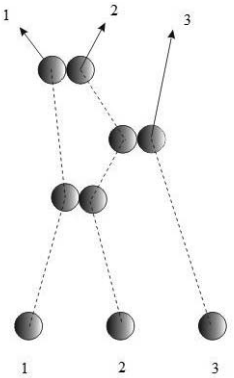

Рис.1(б) Основные траектории частиц тройных столкновений молекул.

В процессе тройных столкновений должны сохраняться массы, импульс, энергии и момент инерции.

$$m_1\bar{\xi}_1 + m_2\bar{\xi}_2 + m_3\bar{\xi}_3 = m_1\bar{\xi}_1' + m_2\bar{\xi}_2' + m_3\bar{\xi}_3',$$

$$m_1\bar{\xi}_1^{\,2} + m_2\bar{\xi}_2^{\,2} + m_3\bar{\xi}_3^{\,2} = m_1\bar{\xi}_1'^2 + m_2\bar{\xi}_2'^2 + m_3\bar{\xi}_3'^2,$$

$$\frac{m_1\bar{\xi}_1^{\,2}}{2} + \frac{m_2\bar{\xi}_2^{\,2}}{2} + \frac{m_3\bar{\xi}_3^{\,2}}{2} = \frac{m_1\bar{\xi}_1'^2}{2} + \frac{m_2\bar{\xi}_2'^2}{2} + \frac{m_3\bar{\xi}_3'^2}{2},$$

$$m_1\bar{\xi}_1 \times \bar{r}_1 + m_2\bar{\xi}_2 \times \bar{r}_2 + m_3\bar{\xi}_3 \times \bar{r}_3$$

$$= m_1\bar{\xi}_1' \times \bar{r}_1 + m_2\bar{\xi}_2' \times \bar{r}_2 + m_3\bar{\xi}_3' \times \bar{r}_3$$

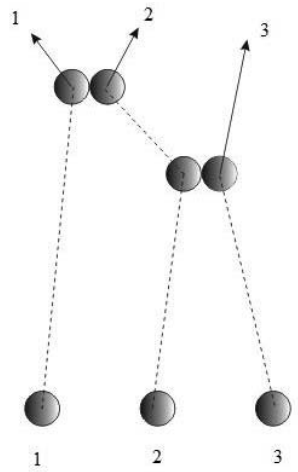

Рис.1(в) Основные траектории частиц тройных столкновений молекулолкновений молекул.

Скорости частиц после тройных столкновений имеет вид

$$\bar{\xi}_1' = \bar{\xi}_1 + \bar{n}(\bar{n}\ \bar{g}),$$

$$\bar{\xi}_1'' = \bar{\xi}_1' + \bar{n}(\bar{n}\ \bar{g}),$$

$$\bar{\xi}_2' = \bar{\xi}_2 - \bar{n}(\bar{n}\ \bar{g}),$$

$$\bar{\xi}_2'' = \xi_2' - \bar{n}(\bar{n}\ \bar{g}),$$

$$\bar{\xi}_3' = \bar{\xi}_3 - \bar{n}(\bar{n}\ \bar{g}),$$

$$\bar{\xi}_3'' = \bar{\xi}_3' - \bar{n}(\bar{n}\ \bar{g}).$$

Скоростное отношение до и после столкновения равны

$$g^2 = \left|\bar{\xi}_1 - \bar{\xi}_2\right| = \left|\bar{\xi}_3 - \bar{\xi}_1\right| = g'^2.$$

Рассмотрим несколько результатов, полученных из функции распределения молекул. Эти результаты представлены авторамим в работах [6-9]. Число частиц, использованное в этом сосуде, составляло 9 x 10^5.

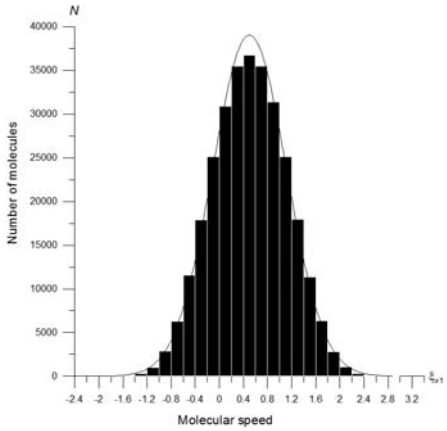

Рис.2(а) Скорость молекул ξ_1 до столкновения.

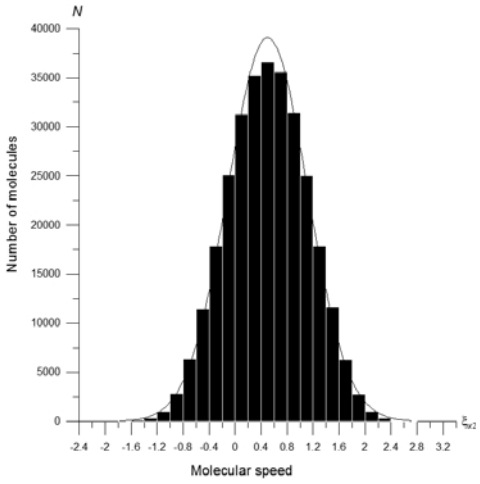

Рис.2(б) Скорость молекул ξ_2 до столкновения.

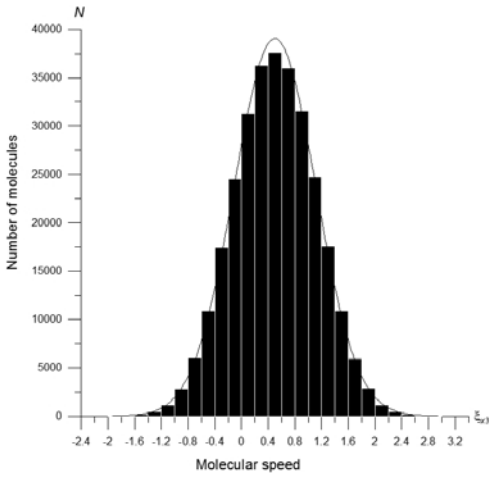

Рис.2(в) Скорость молекул ξ_3 до столкновения.

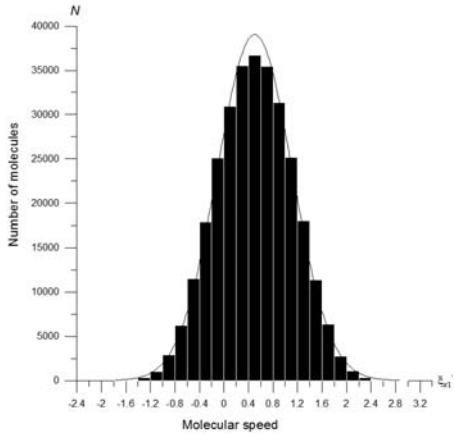

Рис.3(а) Скорость молекул ξ_1 после столкновения.

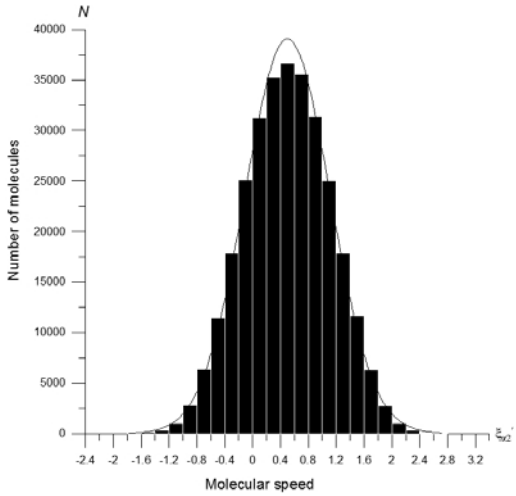

Рис.3(в) Скорость молекул ξ_2 после столкновения.

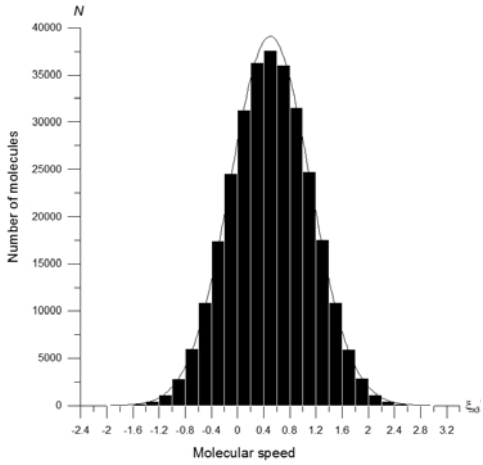

Рис.3(в) Скорость молекул ξ_3 после столкновения.

Из графиков ясно, что скорости молекул до и после столкновения совпадали. На рис. 2(а, б, в) показаны скорости молекул до столкновения и на рис. 3(а, б, в) после столкновения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Тройное столкновение может иметь место, когда молекула столкнется с парной молекулой. Упругое столкновение определяется как столкновение, в котором не происходит обмена между поступательной и внутрнней энергиями. Хотя потенциал Леннард-Джонса и используется при моделировании жидкости и твёрдых тел, строго говоря, взаимодействие молекул при больших плотностях уже не является парным. В конденсированных средах на рассматриваемую пару молекул влияют молекулы окружения. Так было найдено, что для твёрдого аргона вклад в энергию от тройных взаимодействий может достигать 10 процентов [10]. Однако, учет тройных взаимодействий вычислительно слишком дорог, поэтому обычно довольствуются неким эффективным парным потенциалом, где параметры ε и σ отличаются от таковых для разреженных газов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Коган М.Н. Динамика разреженного газа. Кинетическая теория. – М.: Наука, 1967.
   Kogan, M.N (1967), Dinamika razrezhennogo gaza [Rarefied Gas Dynamics], Science, Moscow, Russia.
2. Bird G.A. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. – Oxford: Clarendon Press, 1994.
3. Белоцерковский О.М., Хлопков Ю.И. Методы Монте-Карло в механике жидкости и газа. — М.: Азбука, 2008. – 330 С.
   Belotserkovskii, O.M. and Khlopkov, Y.I. (2008), Metody Monte-Karlo v mekhanike zhidkosti i gaza [Monte Carlo Methods in Mechanics of Fluid and Gas], Azbuka, Moscow, Russia.
4. Хлопков Ю.И. Статистическое моделирование в вычислительной аэродинамике. – М.: Азбука, 2006. – 158 С.
   Khlopkov, Yu.I. (2006), Statisticheskoe modelirovanie v vychislitelnoi aerodinamike [Statistical modeling in computational aerodynamics], MIPT, Moscow, Russia.
5. Лифшиц Е.М, Питаевский Л.П. Физическая кинетика. – М.: Физматлит. – 2002. – 536 С.
   Lifshic, E.M. and Pitaevskij, L.P. (2002), Fizicheskaja kinetika [Physical kinetics], Physmathlist, Moscow, Russia.
6. Зея Мьо Мьинт, Чжо Зин. О тройных столкновениях молекул // Труды 52-ой научной конференции МФТИ. – Жуковский. – 2009. – С. 156 – 158.
   Zay Yar Myo Myint and Kyaw Zin (2009), About triple collisions of molecules, Trudy of science conference of MIPT, Zhukovsky, pp. 156-158.
7. Khlopkov Yu.I, Khlopkov A.Yu., Zay Yar Myo Myint Modelling of processes of triple collisions of molecules // International Research and Practical Conference “Science, education and technology: results of 2013”, Donetsk, Ukraine. – 2013. P. 49 – 54.
8. Khlopkov Yu.I., Zay Yar Myo Myint, Khlopkov A.Yu. The triple collisions of molecules // Physical Chemistry: An Indian journal, India. – 2014. – Vol. 9. – Issue 4. –P. 137 – 140.
9. Khlopkov Yu.I., Khlopkov A.Yu., Zay Yar Myo Myint Processes of triple collisions of molecules // Proceeding of 29th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Xian, China. – 2014 (July 13-18).
10. Axilord B. M., Teller E. Interaction of the van der Waals type between three atoms // J. Chem. Phys. – 1943. – No. 11. – P. 299 – 300.