



Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Ю. Н. Беляев, В. Б. Леонас, Кинетические свойства
диссоциирующего водорода, *ТВТ*, 1967, том 5, вы-
пуск 6, 1123–1124

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru под-
разумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 18.97.14.83

19 января 2025 г., 05:44:50



КИНЕТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДИССОЦИИРУЮЩЕГО ВОДОРОДА

Ю. Н. Беллев, В. В. Леонас

Наиболее эффективным методом определения кинетических свойств газов при высоких (свыше 1000° К) температурах является вычисление соответствующих коэффициентов переноса по формулам кинетической теории на основе известных потенциалов межмолекулярного взаимодействия [1]. Потенциалы взаимодействия атомов водорода могут быть получены из строгих квантовомеханических вычислений [2], и перенос в полностью диссоциированном водороде может быть точно рассчитан на основе этих данных. Однако потенциалы взаимодействия систем Н—Н₂ и Н₂—Н₂, характерных для частично диссоциированного водорода, не удается получить столь же строгим путем — вместо этого используют приближенный, так называемый полуэмпирический метод [3]. Для полученных этим методом потенциалов взаимодействия нельзя априори установить степень их неточности, а следовательно, и погрешность определяемых на их основе кинетических коэффициентов.

Значительный интерес поэтому представляет экспериментальное определение эффективных потенциалов межмолекулярного взаимодействия для систем Н—Н₂,

Таблица 1

Параметры эффективного потенциала взаимодействия ($V = K/r^n$) изученных систем

Система	K [эв·Å ⁿ]	n	Δr [Å]	Система	K [эв·Å ⁿ]	n	Δr [Å]
Н—Н ₂	0,91	4,15	1,24—1,00	Н ₂ —He	5	3,8	1,89—1,15
Н—He	1,2	2,7	1,35—0,79	Н ₂ —Н ₂	14,1	5,87	1,95—1,34

Н₂—Н₂. Необходимые данные могут быть получены из изучения упругого рассеяния быстрых пучков атомов и молекул водорода в Н₂. В работе авторов [4] получены параметры эффективного потенциала взаимодействия для систем Н—Н₂, Н₂—Н₂, Н—He и Н₂—He. Экспериментальное изучение системы Н—Н, принципиально возможное, не представлялось оправданным из-за достаточной достоверности результатов квантовомеханических расчетов.

В табл. 1 приводятся экспериментально найденные параметры K и n потенциала вида $V = K/r^n$, а также интервал расстояний наибольшего сближения, для которого эти параметры справедливы. Указанные интервалы включают в себя расстояния наибольшего сближения, реализующиеся при столкновениях в газе с температурой от 2—3 до 10 тыс. °К.

Таблица 2

Значения «интегралов столкновения» $\Omega^{(1,1)}$, $\Omega^{(2,2)}$ [Å²] для исследованных систем

Температура, °К	Н—Н ₂		Н ₂ —Н ₂		Н—He		Н ₂ —He	
	$\Omega^{(1,1)}$	$\Omega^{(2,2)}$	$\Omega^{(1,1)}$	$\Omega^{(2,2)}$	$\Omega^{(1,1)}$	$\Omega^{(2,2)}$	$\Omega^{(1,1)}$	$\Omega^{(2,2)}$
2000	1,78	2,302	3,3744	4,634	3,305	4,298	4,625	5,954
3000	1,46	1,887	3,258	4,033	2,444	3,179	3,742	4,816
4000	1,27	1,644	2,96	3,664	1,978	2,572	3,214	4,137
5000	1,141	1,475	2,744	3,396	1,676	2,179	2,858	3,679
6000	1,046	1,351	2,573	3,192	1,463	1,902	2,595	3,340
7000	0,971	1,256	2,444	3,027	1,307	1,700	2,394	3,081
8000	0,91	1,177	2,336	2,890	1,184	1,539	2,234	2,875
9000	0,862	1,114	2,244	2,779	1,084	1,410	2,099	2,703
10000	0,818	1,057	2,164	2,679	1,003	1,305	1,982	2,551

Значения параметров потенциала позволяют вычислить с помощью стандартных формул кинетической теории «интегралы столкновений» $\Omega^{(1,1)}$ и $\Omega^{(2,2)}$, определяющие величины коэффициентов переноса [5]:

$$\Omega^{(1,1)} = \left(\frac{Kn}{kT} \right)^{2/n} \Gamma \left(3 - \frac{2}{n} \right) A^{(1)}(n),$$

$$\Omega^{(2,2)} = \frac{1}{2} \left(\frac{Kn}{kT} \right)^{2/n} \Gamma \left(4 - \frac{2}{n} \right) A^{(2)}(n),$$

где K и n — параметры потенциала, k — постоянная Больцмана, $\Gamma(n)$ — гамма-функция, $A^{(1)}$ и $A^{(2)}$ — постоянные, табулированные в [5].

Значения $\Omega^{(1,1)}$ и $\Omega^{(2,2)}$ для исследованных систем в диапазоне температур 2000—10000° К приведены в табл. 2, и эти значения обеспечивают основу для вычисления простым путем коэффициентов переноса как для равновесного, так и неравновесного состава диссоциирующего водорода и водородно-гелиевых смесей.

Интегралы столкновений $\Omega^{(1,1)}$ и $\Omega^{(2,2)}$ для $H-H_2$ и H_2-H_2 были вычислены в работе [3] на основе данных, полученных полуэмпирическим методом; соответствующие значения заметно расходятся с приведенными в табл. 2 — различие составляет от 20 до 40% для H_2-H_2 и 200% для $H-H_2$. Поскольку данные табл. 2 получены на основе прямых экспериментов, проводившихся с достаточно высокой точностью [4], то они заслуживают, очевидно, предпочтения перед данными работы [3].

Таким образом, использование данных табл. 2 и значений $\Omega^{(1,1)}$ и $\Omega^{(2,2)}$ для системы $H-H$ [3], вычисленных по результатам точных квантовомеханических расчетов, позволяет решить задачу определения кинетических свойств водорода и его смеси с гелием в широком интервале температур.

Московский государственный
университет им. М. В. Ломоносова
Научно-исследовательский институт
механики МГУ

Поступила в редакцию
19 V 1966

ЛИТЕРАТУРА

1. В. Б. Леонас, Е. В. Самуилов. Теплофизика высоких температур, 4, 710, 1966.
2. H. M. James, A. S. Coolidge, R. D. Present. J. Chem. Phys., 4, 187, 1936.
3. E. A. Mason, J. T. Vanderslice. Phys. Fluids, 5, 155, 1962.
4. Ю. Н. Беляев, В. Б. Леонас. Докл. АН СССР, 173, 306, 1966.
5. Дж. Гиршфельдер, Г. Кертисс, Р. Бёрд. Молекулярная теория жидкостей и газов. ИЛ, 1961.

ЭНТАЛЬПИЯ И ТЕПЛОЕМКОСТЬ ХРОМА ПРИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

*В. А. Кириллин, А. Е. Шейдлин, В. Я. Чеховской,
И. А. Жукова*

Исследованию энтальпии и теплоемкости хрома при высоких температурах посвящены работы [1—6]. Результаты этих работ расходятся между собой в пределах около 10%. С целью получения более точных данных было проведено экспериментальное исследование энтальпии и теплоемкости электролитического хрома (содержание металла в образцах 99,6 и 99,9 вес.%) в интервале температур 600—2030° К.

Определение энтальпии и теплоемкости хрома проводилось методом смешения. Методика исследования, экспериментальная установка, обработка опытных данных подробно изложены в работах [7—11]. Опыты проводились в атмосфере аргона марки «чистый» при постоянном давлении 1,05 атм. В интервале температур 600—1400° К температура образца измерялась платинородий — платиновой термопарой II разряда, а при температурах выше 1300° К — оптическим пирометром типа ОП-48 с исчезающей нитью.

На основании полученных опытных данных было рассчитано методом наименьших квадратов эмпирическое уравнение для энтальпии хрома. В соответствии с этим ниже приведены уравнения для расчета энтальпии и теплоемкости хрома в интервале температур от 600° К и до точки плавления металла (атомный вес хрома 52,01; 1 кал. = 4,184 джоуля):

$$H_T - H_{273,15} = 4,754T + 1,385 \cdot 10^{-3} T^2 -$$

$$- 1083 \cdot 10^3 \exp\left(-\frac{13,92 \cdot 10^3}{T}\right) - 1402 \left[\frac{\text{кал}}{\text{г} \cdot \text{ат}} \right]. \quad (1)$$

$$c_p = 4,754 + 2,77 \cdot 10^{-3} T + \frac{1,507 \cdot 10^{10}}{T^2} \exp\left(-\frac{13,92 \cdot 10^3}{T}\right) \left[\frac{\text{кал}}{\text{г} \cdot \text{ат} \cdot \text{град}} \right]. \quad (2)$$

Экспериментальные точки по энтальпии хрома и осредняющая их кривая, рассчитанная по уравнению (1), представлены на рисунке. Разброс опытных точек относи-