

РЕЛАКСАЦІЯ ПРОСТОРОВО ОДНОРІДНОЇ ФУНКЦІЇ РОЗПОДІЛУ ЗА УМОВИ НЕОДНОРІДНОГО РОЗПОДІЛУ ЕНЕРГІЇ

А.С. СІЖУК,¹ С.М. ЄЖОВ²

¹Фізичний департамент, Техас A&M Університет

(Станція Коледж, Техас 77843, США; e-mail: cannabiss@mail.univ.kiev.ua)

²Київський національний університет ім. Тараса Шевченка, фізичний факультет

(Просп. Академіка Глушкова, 4, Київ 01601; e-mail: yezhou@univ.kiev.ua)

УДК 533.1, 533.7, 519.9
© 2012

У роботі досліджено релаксацію модельної системи з використанням кінетичного рівняння. У просторово однорідному випадку, а також максвеллівської функції розподілу з неоднорідним розподілом енергії за ступенями вільності (обертальними і поступальними), у першому наближенні за концентрацією знайдено вираз для температури як функції часу. Показано, що із зменшенням різниці між початковим та рівноважним значеннями середньої поступальної енергії і зростанням рівноважної температури час релаксації зменшується. Знайдено, що час релаксації середньої поступальної (обертальної) енергії до рівноважного значення обернено пропорційний кореню квадратному від рівноважної температури та обернено пропорційний концентрації частинок. Для власного моменту інерції, що дорівнює моменту інерції сферичної частинки із ефективним радіусом, значення часу релаксації набуває мінімального значення. Обчислено значення часу релаксації для окремих параметрів частинок системи.

важної термодинаміки [3], так і різних її узагальнень [4–6].

Останніми десятиліттями у зв'язку з розвитком кінетичної теорії молекулярних газів виник і розвивається підхід, що ґрунтується на узагальненому кінетичному рівнянні Больцмана [7–9]. У цьому рівнянні звичайний больцманівський інтеграл модифіковано таким чином, щоб описувати систему частинок, у якій при зіткненнях енергія розподіляється не тільки між поступальними ступенями вільності, а й і обертальними. На основі такого підходу записується система газодинамічних рівнянь, вирази для потоку ентропії тощо.

Розробка моделей, які на якісному рівні можуть адекватно і разом з тим простіше описувати кінетичні процеси у молекулярному газі, є актуальною проблемою, яка має як чисто теоретичне значення, так і є важливою для пояснення експериментальних спостережень особливостей протікання нерівноважних процесів. Так, надзвичайно важливу роль у техніці відіграють процеси теплопередачі газом, процеси релаксації газу до стану рівноваги (див., наприклад, [10]). Наприклад, при розрахунку теплових режимів літальних апаратів, роботи турбіни літака, ракети тощо мають справу з ефективністю енергообміну між шарами газу, між молекулами газу та поверхнею твердого тіла. Механізм теплопередачі в газах у загальному випадку є достатньо складним, але з мікроскопічної точки зору головна проблема полягає в описі розсіяння молекул при зіткненнях між собою (та з поверхнею на відстані середнього вільного пробігу молекул до поверхні) (див., наприклад, [11]). Як показує досвід, у багатьох випадках класичний опис досліджуваної системи є достатнім для якісного аналізу. Для цього можуть бути корисними деякі відносно ідеалізовані моделі.

Процеси релаксації у газах можуть бути описані у термінах обміну енергією при молекулярних зіткнен-

1. Вступ

З тих пір, як Больцман уперше записав кінетичне рівняння, проведена велика кількість теоретичних досліджень нерівноважних процесів у розріджених системах. Обчислення кінетичних коефіцієнтів, в основі яких лежить визначення певної моделі взаємодії частинок середовища, є безпосереднім завданням кінетичної теорії. Однак роль кінетичної теорії цим не вичерпується. Математичний апарат кінетичної теорії, що розвинутий для розрахунку коефіцієнтів переносу і релаксації у випадку розріджених газів, дозволяє встановити межі застосування нерівноважної термодинаміки у випадку довільних фізичних середовищ. Наприклад, для слабо розрідженого одноатомного газу (довжина вільного пробігу набагато менша за характерний розмір задачі) добре розвинуті методи розв'язання кінетичного рівняння Больцмана (метод Чапмена–Енскога [1], метод Греда [2]), які стали базою для обґрунтування як класичної форми нерівно-

нях. Так, у роботі [12] за допомогою властивості симетрії механічної енергії модельної системи відносно дії оператора відбиття на вектор стану двох тіл знайдений фізичний механізм обміну імпульсами та власними моментами імпульсу при зіткненні абсолютно твердих шорстких кульок (класична модель зіткнення двох абсолютно твердих шорстких кульок з точки зору кінематики власних кутових моментів та імпульсів була запропонована ще Бріаном у 1894 році – див., наприклад, [1, 9]). Описаний метод дозволяє знаходити зв'язок між фазами двох модельних молекул до і після зіткнення, не вдаючись до опису взаємодії між частинками за допомогою потенціалу.

У роботах [13–16] розглянуто систему з фіксованим числом частинок і модельним механізмом обміну імпульсами та моментами імпульсу твердих шорстких кульок при зіткненні [12]. На основі динаміки локалізованого (дельта-функційного) розподілу таких частинок у фазовому просторі показано, що кінетичне (макроскопічне) рівняння для такої системи у наближенні боголюбівського розщеплення у дев'ятивимірному фазовому просторі має форму рівняння Больцмана–Енскога, виведене раніше у більш феноменологічному стилі в [1] та розглянуте у гідродинамічному наближенні в [9]. Доведено, що отримане рівняння має розв'язок у вигляді мікроскопічної фазової густини. Отже, у випадку наближення парних зіткнень отримане рівняння точно описує еволюцію динамічної модельної системи.

Тут зазначимо, що динаміка у фазовому просторі локалізованого розподілу таких частинок, взаємодіючих за правилом [12], дозволяє побудувати відповідне еволюційне рівняння (див. [15]), структура якого подібна до рівняння Ліувілля. Таке рівняння може бути використане для побудови ієрархічного ланцюжка рівнянь Боголюбова, наприклад, як це було зроблено для функцій розподілу, залежних від положення та просторової орієнтації довгих молекул у рідких кристалах (див. роботу [17]).

У даній роботі доводиться, що для розглянутої модельної системи ([12]) кінетичне рівняння для величини усередненого моменту імпульсу (або обертового моменту) у просторово однорідному випадку з максвеллівсько-подібною функцією розподілу, при нерівномірному розподілі енергії за ступенями вільності, має аналітичний розв'язок. Отриманий розв'язок використовується для визначення та обчислення часу релаксації системи до стану термодинамічної рівноваги.

Максвеллівсько-подібний розподіл як спосіб опису поведінки системи біля рівноважного стану був за-

пропонований Ландау вперше у [18] під час розгляду задачі про вирівнювання температур двокомпонентної плазми. За певних умов (див. [18] і [19]) такий метод дозволяє досить вдало описувати релаксацію двокомпонентної плазми. Проте, як може бути показано на базі узагальненого в [19] підходу Чапмена–Енскога при розгляді двокомпонентної плазми, “традиційна ідея про універсальну роль максвеллівського розподілу при описі квазірівноважних станів не підтверджується ...” (цитата з [19]). Більше того, як було знайдено в [20], користуючись методом Чапмена–Енскога (див. [1]), незалежні від часу квазірівноважні стани двотемпературної плазми, взагалі кажучи, не є “чистими” максвеллівськими. Цікаво тут зазначити, що отриманий у нашій роботі точний аналітичний розв'язок доводить, що задане початкове збудження у формі максвеллівсько-подібної функції розподілу з різними поступальними та обертовими “температурами” і збереження такої форми з часом можуть гарантувати повернення системи у стан з однаковими розподілами енергії за ступенями вільності. Проте, подальшого дослідження потребує питання збереження такої максвеллівсько-подібної форми з часом для розглянутого випадку інтеграла зіткнення (див. [13, 15]). На користь використаного тут модельного розподілу свідчить можливий набагато нижчий порядок квазірівноважних поправок для задачі в [19], навіть у випадку існування достатньо малопотужного джерела енергії (частинок), розглянутого в [21]. Можливо, більш загальні релаксаційні властивості (як, наприклад, затухаюча періодична перекачка енергії між обертовими і поступальними ступенями) можна буде отримати за допомогою розробленого у [19] методу. При цьому слід також зауважити, що розглянута максвеллівська форма початкового розподілу з різними поступальними та обертовими “температурами” може бути фізично обґрунтована можливістю “надшвидкого” збудження електромагнітним імпульсом обертового руху молекул (наприклад, достатньо сильний імпульс у далекій інфрачервоній області протягом часу зіткнення, коли у неполярних молекул збуджується дипольний момент) та відносно невеликою кількістю “збуджених” молекул порівняно з тими, що “ще” беруть участь у локальній рівновазі (що загально прийнято і спостерігається на обертових та коливально-обертових спектрах молекул).

Наведене тут теоретичне дослідження “релаксаційної” кінетики модельної системи може бути застосоване, наприклад, для опису достатньо розрідженої системи неполярних молекул. Отримані результати є актуальними у такій сучасній галузі дослідження,

де вивчаються розріджені системи достатньо важких молекул, наночастинок (див., наприклад, [22]). Закономірності протікання нерівноважних процесів у таких системах суттєво відрізняються, наприклад, від процесів у звичайному одноатомному газі ([8, 10]).

2. Релаксація функції розподілу максвеллівського типу

Розглянемо замкнену просторово однорідну систему біля положення рівноваги. Дослідимо залежність середньої енергії поступального руху молекул від часу у випадку, коли початкові середні енергії поступального та обертального рухів різні (див. [16]). Для цього знайдемо похідну за часом від середньої поступальної енергії:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle P^2 \rangle &= \frac{d}{dt} \int f(\mathbf{X}, t) P^2 d\mathbf{X} = \\ &= \int P^2 \frac{d}{dt} f(\mathbf{X}, t) d\mathbf{X} = \int I_B(\mathbf{X}, t) P^2 d\mathbf{X}, \end{aligned} \quad (1)$$

де $f(\mathbf{X}, t)$ – функція розподілу, I_B – інтеграл зіткнень; при цьому $\frac{d}{dt} f(\mathbf{X}, t) = I_B(\mathbf{X}, t)$ у випадку просторово однорідної системи та $\mathbf{X} = \left(\frac{\mathbf{p}}{\sqrt{m}}, \frac{\mathbf{M}}{\sqrt{J}} \right) = (\mathbf{P}, \mathbf{M})$. Тут, \mathbf{p} та \mathbf{M} – (фазові) імпульс та власний обертальний момент відповідно.

Оскільки для замкненої системи

$$\frac{d}{dt} (\langle P^2 \rangle + \langle M^2 \rangle) = 0, \quad (2)$$

то

$$\frac{d}{dt} \langle P^2 \rangle = - \frac{d}{dt} \langle M^2 \rangle. \quad (3)$$

Тоді після підстановки $I_B(\mathbf{X}, t)$ у вигляді, впроваджену у роботі [15], в рівняння (1), матимемо

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle P^2 \rangle &= - \frac{a^2}{\sqrt{m}} n \times \\ &\times \int \left(\int_{(\mathbf{P}' - \mathbf{P})\sigma \geq 0} (\mathbf{P}' - \mathbf{P})\sigma \left\{ \hat{b}(\sigma) - 1 \right\} \times \right. \\ &\left. \times f(\mathbf{X}', t) f(\mathbf{X}, t) d\sigma d\mathbf{X}' \right) M^2 d\mathbf{X}, \end{aligned} \quad (4)$$

де n – концентрація. Дія оператора $\hat{b}(\sigma)$ визначається механізмом розсіяння двох абсолютно шорстких твердих кульок при зіткненні [12]:

$$\hat{b}(\sigma) \cdot f(t, \mathbf{X}) f(t, \mathbf{X}') = f(t, \mathbf{X}^*) f(t, \mathbf{X}'^*),$$

де фази до і після зіткнення зв'язані за таким правилом:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^* &= \frac{1}{1 + \varkappa} \left[\varkappa \mathbf{P} + \mathbf{P}' + \sqrt{\varkappa} [(M + M') \times \sigma] - \right. \\ &\left. - \varkappa \sigma \{ (P - P') \sigma \} \right], \\ \mathbf{M}^* &= \frac{1}{1 + \varkappa} \left[M - \varkappa M' + \sqrt{\varkappa} [\sigma \times (P - P')] + \right. \\ &\left. + \varkappa \sigma \{ (M + M') \sigma \} \right], \\ \mathbf{P}'^* &= \frac{1}{1 + \varkappa} \left[\varkappa \mathbf{P}' + \mathbf{P} - \sqrt{\varkappa} [(M + M') \times \sigma] + \right. \\ &\left. + \varkappa \sigma \{ (P - P') \sigma \} \right], \\ \mathbf{M}'^* &= \frac{1}{1 + \varkappa} \left[M' - \varkappa M + \sqrt{\varkappa} [\sigma \times (P - P')] + \right. \\ &\left. + \varkappa \sigma \{ (M + M') \sigma \} \right]. \end{aligned} \quad (5)$$

Тут одиничний вектор напрямлений від центра кульки з фазою \mathbf{X} до центра кульки з фазою \mathbf{X}' ; відповідно, $d\sigma$ – нескінченно малий елемент просторового кута.

Припустимо, що $f(t, \mathbf{X})$ має вигляд

$$f(\mathbf{X}, t) = \frac{1}{(T_1 T_2)^{3/2} \pi^3} e^{-\frac{P^2}{T_1} - \frac{M^2}{T_2}}, \quad (6)$$

де для зручності подвійна стала Больцмана дорівнює одиниці (або температура має відповідні одиниці вимірювання). Згідно з першим рівнянням:

$$\frac{3}{2} T_1(t) = \langle P^2 \rangle, \quad \frac{3}{2} T_2(t) = \langle M^2 \rangle,$$

що відповідає трьом поступальним та трьом обертальним ступеням вільності. Відзначимо тут, що T_1 та T_2 позначають середні поступальну та обертальну складові повної механічної енергії системи і, строго кажучи, не можуть розглядатись як термодинамічні характеристики. Тоді для температури (у зазначеному вище сенсі), що відповідає поступальним ступеням вільності, отримаємо рівняння

$$\begin{aligned} \frac{3}{2} \frac{d}{dt} T_1(t) &= - \frac{a^2}{\sqrt{m}} \left(\frac{1}{(T_1 T_2)^{3/2} \pi^3} \right)^2 n \int M^2 \times \\ &\times \left(\int_{(\mathbf{P}' - \mathbf{P})\sigma \geq 0} (\mathbf{P}' - \mathbf{P})\sigma \left\{ e^{-\frac{P^{*2} + P'^{*2}}{T_1}} e^{-\frac{M^{*2} + M'^{*2}}{T_2}} - \right. \right. \\ &\left. \left. - e^{-\frac{P^2 + P'^2}{T_1}} e^{-\frac{M^2 + M'^2}{T_2}} \right\} d\sigma d\mathbf{P}' d\mathbf{M}' \right) d\mathbf{P} d\mathbf{M}. \end{aligned} \quad (7)$$

Змінюємо порядок інтегрування та робимо заміну змінних у першому доданку $(\mathbf{X}, \mathbf{X}') \leftrightarrow (\mathbf{X}^*, \mathbf{X}'^*)$ та $\boldsymbol{\sigma} \leftrightarrow -\boldsymbol{\sigma}$. Тоді (7) можна навести у вигляді

$$\begin{aligned} \frac{3}{2} \frac{d}{dt} T_1(t) &= -\frac{a^2}{\sqrt{m}} \left(\frac{1}{(T_1 T_2)^{3/2} \pi^3} \right)^2 n \times \\ &\times \int \left(\int_{(\mathbf{P}' - \mathbf{P})\boldsymbol{\sigma} \geq 0} (\mathbf{P}' - \mathbf{P})\boldsymbol{\sigma} \{M^{*2}(-\boldsymbol{\sigma}) - M^2\} \times \right. \\ &\times e^{-\frac{P^2 + P'^2}{T_1(t)}} e^{-\frac{M^2 + M'^2}{T_2(t)}} d\mathbf{P}' d\mathbf{M}' d\mathbf{P} d\mathbf{M} \left. \right) d\boldsymbol{\sigma}, \end{aligned} \quad (8)$$

де $M^{*2}(-\boldsymbol{\sigma})$ виражається за допомогою співвідношень, що описують модельну систему твердих шорстких кульок у випадку дзеркального відбиття (5) дво-частинкової фази при зіткненнях, тут дужки $(-\boldsymbol{\sigma})$ позначають тільки функціональну залежність від напрямку одиничного вектора.

Обчислимо інтеграл, що стоїть у правій частині виразу (8):

$$\begin{aligned} \mathfrak{J} &= \int \left(\int_{(\mathbf{P}' - \mathbf{P})\boldsymbol{\sigma} \geq 0} (\mathbf{P}' - \mathbf{P})\boldsymbol{\sigma} \{M^{*2}(-\boldsymbol{\sigma}) - M^2\} \times \right. \\ &\times e^{-\frac{P^2 + P'^2}{T_1}} e^{-\frac{M^2 + M'^2}{T_2}} d\mathbf{P}' d\mathbf{M}' d\mathbf{P} d\mathbf{M} \left. \right) d\boldsymbol{\sigma} = \\ &= \int \left(\int_{(\mathbf{P}' - \mathbf{P})\boldsymbol{\sigma} \geq 0} (\mathbf{P}' - \mathbf{P})\boldsymbol{\sigma} e^{-\frac{P^2 + P'^2}{T_1}} e^{-\frac{M^2 + M'^2}{T_2}} \times \right. \\ &\times \left\{ \frac{1}{(1 + \varkappa)^2} \left\{ \mathbf{M} - \varkappa \mathbf{M}' + \sqrt{\varkappa} [-\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{P} - \mathbf{P}'] + \right. \right. \\ &\left. \left. + \varkappa \boldsymbol{\sigma} (\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{M} + \mathbf{M}')) \right\}^2 - M^2 \right\} d\mathbf{P}' d\mathbf{M}' d\mathbf{P} d\mathbf{M} \left. \right) d\boldsymbol{\sigma}. \end{aligned} \quad (9)$$

Тут квадратні дужки з комою [,] позначають векторний добуток.

Після переходу до нової декартової системи координат $(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\sigma})$, у якій вісь $OZ \parallel \boldsymbol{\sigma}$, інтеграл \mathfrak{J} набуде вигляду

$$\frac{1}{(1 + \varkappa)^2} \int \left(\int_{(\mathbf{P}' - \mathbf{P})\boldsymbol{\sigma} \geq 0} d\mathbf{P}' d\mathbf{M}' d\mathbf{P} d\mathbf{M} (P'_\sigma - P_\sigma) \times \right.$$

$$\begin{aligned} &\times e^{-\frac{P_\sigma^2 + P_\xi^2 + P_\eta^2 + P_\sigma'^2 + P_\xi'^2 + P_\eta'^2}{T_1}} e^{-\frac{M_\sigma^2 + M_\xi^2 + M_\eta^2 + M_\sigma'^2 + M_\xi'^2 + M_\eta'^2}{T_2}} \times \\ &\times \left\{ -(\varkappa^2 + 2\varkappa)(M_\xi^2 + M_\eta^2) + \varkappa^2(M_\xi'^2 + M_\eta'^2) - \right. \\ &- 2\varkappa(M'_\xi M_\xi + M'_\eta M_\eta) + 2\sqrt{\varkappa}(M_\eta - kM'_\eta)(P_\xi - P'_\xi) + \\ &+ 2\sqrt{\varkappa}(kM'_\xi - M_\xi)(P_\eta - P'_\eta) + \varkappa(P_\xi - P'_\xi)^2 + \\ &\left. + \varkappa(P_\eta - P'_\eta)^2 \right\} d\boldsymbol{\sigma}, \end{aligned} \quad (10)$$

де $d\mathbf{P} = dP_\sigma dP_\xi dP_\eta$, і аналогічно інші диференціали.

Оскільки степінь експоненти є парною функцією та інтегрування здійснюється в усьому фазовому просторі, то інтеграли по непарних степенях змінних у фігурних дужках дорівнюють нулю, також взаємознищуються інтеграли від подібних протилежних за знаком доданків у фігурних дужках. Тоді останню формулу можна переписати так:

$$\begin{aligned} \mathfrak{J} &= \frac{1}{(1 + \varkappa)^2} \int \left(\int_{(\mathbf{P}' - \mathbf{P})\boldsymbol{\sigma} \geq 0} (P'_\sigma - P_\sigma) \times \right. \\ &\times e^{-\frac{P_\sigma^2 + P_\xi^2 + P_\eta^2 + P_\sigma'^2 + P_\xi'^2 + P_\eta'^2}{T_1}} e^{-\frac{M_\sigma^2 + M_\xi^2 + M_\eta^2 + M_\sigma'^2 + M_\xi'^2 + M_\eta'^2}{T_2}} \times \\ &\times \left\{ -2\varkappa(M_\xi^2 + M_\eta^2) - 2\varkappa(M'_\xi M_\xi + M'_\eta M_\eta) + \right. \\ &\left. + \varkappa(P_\xi - P'_\xi)^2 + \varkappa(P_\eta - P'_\eta)^2 \right\} d\mathbf{P}' d\mathbf{M}' d\mathbf{P} d\mathbf{M} \left. \right) d\boldsymbol{\sigma}. \end{aligned} \quad (11)$$

Уведемо нові змінні: $(\tilde{\mathbf{P}}, \tilde{\mathbf{M}}) = \left(\frac{\mathbf{P}}{\sqrt{T_1}}, \frac{\mathbf{M}}{\sqrt{T_2}} \right)$. Тоді, враховуючи рівноправність змінних інтегрування P_ξ, P_η та P'_ξ, P'_η (це видно після розкриття дужок), у нових позначеннях \mathfrak{J} матиме вигляд

$$\begin{aligned} \mathfrak{J} &= -\frac{2\varkappa}{(1 + \varkappa)^2} T_1^{7/2} T_2^3 \int \left(\int_{\tilde{P}'_\sigma - \tilde{P}_\sigma \geq 0} (\tilde{P}'_\sigma - \tilde{P}_\sigma) \times \right. \\ &\times e^{-(\tilde{P}^2 + \tilde{P}'^2 + \tilde{M}^2 + \tilde{M}'^2)} \left\{ T_2(\tilde{M}_\xi^2 + \tilde{M}_\eta^2) - \right. \end{aligned}$$

$$-T_1(\tilde{P}_\xi^2 + \tilde{P}_\eta^2) \left. \right\} d\tilde{P}' d\tilde{M}' d\tilde{P} d\tilde{M} \Big) d\sigma =$$

$$= -\frac{2\kappa}{(1+\kappa)^2} T_1^{7/2} T_2^3 \{T_2 - T_1\} \cdot \tilde{\mathcal{J}}, \quad (12)$$

де

$$\tilde{\mathcal{J}} = 2 \int \left(\int_{\tilde{P}'_\sigma - \tilde{P}_\sigma \geq 0} (\tilde{P}'_\sigma - \tilde{P}_\sigma) e^{-(\tilde{P}^2 + \tilde{P}'^2 + \tilde{M}^2 + \tilde{M}'^2)} \times \right.$$

$$\left. \times \tilde{P}_\xi^2 d\tilde{P}' d\tilde{M}' d\tilde{P} d\tilde{M} \right) d\sigma. \quad (13)$$

Із співвідношення $3T = \frac{3}{2}(T_1 + T_2) = \text{const}$ випливає, що $T_2 = 2T - T_1$, і рівняння еволюції для температури матиме такий вигляд:

$$\frac{3}{2} \frac{d}{dt} T_1 = 2 \frac{a^2}{\sqrt{m}} n \frac{1}{\pi^6} \frac{2\kappa}{(1+\kappa)^2} T_1^{1/2} (T - T_1) \cdot \tilde{\mathcal{J}}. \quad (14)$$

Отримане рівняння розв'язується у квадратурах після розділення змінних:

$$\int_{T_1(0)}^{T_1(t)} \frac{dT_1}{T_1^{1/2} (T - T_1)} = \int_0^t \nu dt, \quad (15)$$

де

$$\nu = \frac{4}{3} \frac{a^2}{\sqrt{m}} n \frac{1}{\pi^6} \frac{2\kappa}{(1+\kappa)^2} \cdot \tilde{\mathcal{J}}. \quad (16)$$

Після інтегрування рівняння (15) матимемо

$$\ln \left(\left| \frac{\sqrt{T} + \sqrt{T_1(t)}}{\sqrt{T} - \sqrt{T_1(t)}} \right| \cdot \left| \frac{\sqrt{T} - \sqrt{T_1(0)}}{\sqrt{T} + \sqrt{T_1(0)}} \right| \right) = \sqrt{T} \nu t. \quad (17)$$

Звідки остаточно матимемо для середньої поступальної енергії:

$$T_1(t) = T \frac{(c - e^{-\sqrt{T} \nu t})^2}{(c + e^{-\sqrt{T} \nu t})^2}, \quad \text{при } T_1(0) < T; \quad (18)$$

$$T_1(t) = T \frac{(c + e^{-\sqrt{T} \nu t})^2}{(c - e^{-\sqrt{T} \nu t})^2}, \quad \text{при } T_1(0) > T, \quad (19)$$

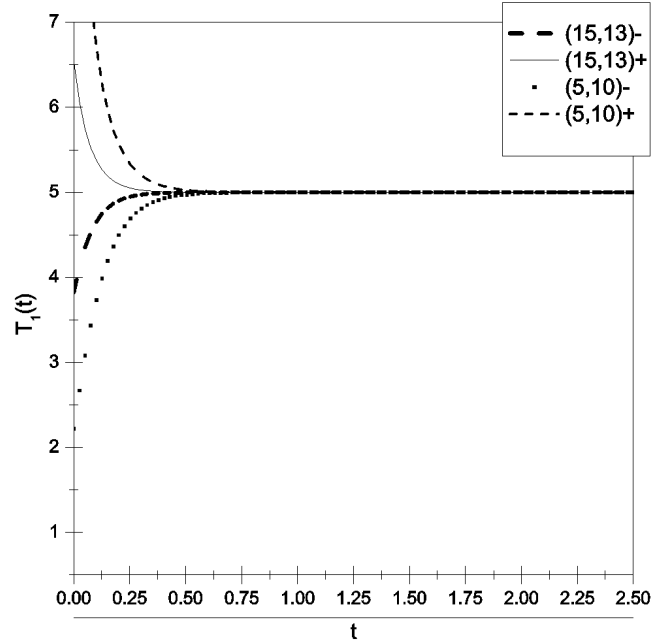


Рис. 1. Залежність середньої поступальної енергії від часу. Різні знаки відповідають відповідно різним співвідношенням: $T_1 < T$ для плюса та $T_1 > T$ для мінуса. У дужках записана послідовність параметрів у відносних одиницях ($c, T_1^{1/2} \nu$)

де

$$c = \left| \frac{\sqrt{T} + \sqrt{T_1(0)}}{\sqrt{T} - \sqrt{T_1(0)}} \right|. \quad (20)$$

Для наглядності та спрощення аналізу отриманого результату проілюструємо залежність температури від часу для різних значень c та $\sqrt{T} \nu$.

З рис. 1 можна зробити висновок про те, що час релаксації середньої поступальної енергії T_1 до рівноважної T зменшується із зростанням $\sqrt{T} \nu$ та c . Відповідно, час релаксації із одночасним зменшенням ν та c буде зростати.

2.1. Час релаксації

Розглянемо вираз для часової залежності середньої поступальної енергії та дослідимо кінетичний параметр цього процесу – час релаксації. За умовою $T \cong T_1$, тоді матимемо наближений вираз

$$\ln \left| \frac{\sqrt{T} - \sqrt{T_1(0)}}{\sqrt{T} - \sqrt{T_1(t)}} \right| \cong \sqrt{T} \nu t. \quad (21)$$

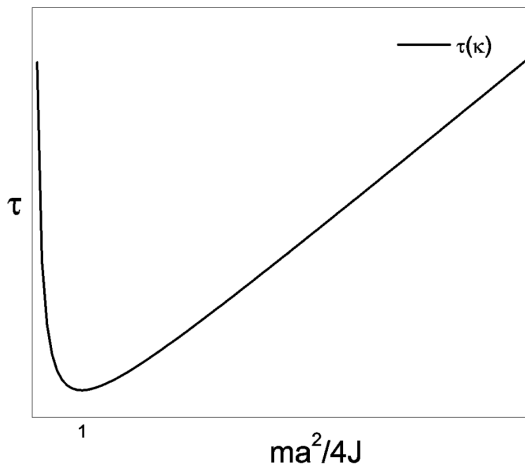


Рис. 2. Залежність часу релаксації τ від параметра $\kappa = ma^2/4J$

Час релаксації $\tau = \frac{1}{\sqrt{T} \nu}$ можна визначити із умови

$$\left| \frac{\sqrt{T} - \sqrt{T_1(0)}}{\sqrt{T} - \sqrt{T_1(t)}} \right| = e,$$

яка приводить до результату

$$\tau = \frac{3\pi^6 \sqrt{m} (1 + \kappa)^2}{8\tilde{J} \sqrt{T} a^2 n \kappa}, \tag{22}$$

або

$$\tau = \frac{3\pi^6 (ma^2 + 4J)^2}{32\tilde{J} \sqrt{T} \sqrt{ma^4} n J}, \tag{23}$$

де J – власний момент інерції молекули.

На рис. 2 відображена залежність часу релаксації від параметра κ . Мінімальне значення τ відповідає значенню $\kappa = 1$, або $J = \frac{ma^2}{4}$. Тобто, для власного моменту інерції, що дорівнює моменту інерції сферичної частинки, маємо єдиний екстремум функції $\tau(J)$. Крім того, час релаксації обернено пропорційний кореню квадратному від рівноважної температури та обернено пропорційний концентрації частинок.

Врахуємо, що наближене значення середньої довжини пробігу частинок – $L = \frac{1}{\pi n a^2}$, а середня швид-

кість теплового руху дорівнює $\vartheta = \sqrt{\frac{3RT}{\mu}}$. Тоді, ви-

користовуючи значення інтеграла $\tilde{J} = 2\sqrt{2}\pi^{13/2}$, ви-

$$\tau = \frac{3\sqrt{\pi} L (1 + \kappa)^2}{32 \vartheta \kappa}. \tag{24}$$

У таблиці наведено значення часу релаксації для деяких параметрів частинок системи.

Для даної температури та концентрації відношення часів релаксації системи кульок τ_{\bullet} до часу релаксації системи сфер τ_{\circ} наближено дорівнює 1,23. Система важких сферичних частинок з молярною масою 0,72 кг/моль може відповідати системі фулеренів (система молекул C_{60}). При обчисленні часу релаксації вважалося, що довжина вільного пробігу приблизно дорівнює 10^{-5} – 10^{-4} м, що при заданому діаметрі частинок ($\simeq 10^{-8}$ м) відповідає зміні концентрації на порядок.

У виразі для часу релаксації розглянутої системи можна виділити множник, що характеризує час релаксації одноатомного газу $\tilde{\tau}$. Оскільки, час релаксації для одноатомного газу порядку відношення довжини вільного пробігу до середньої швидкості, то (24) можна подати у такому вигляді:

$$\tau = \frac{3\sqrt{\pi} (1 + \kappa)^2}{32 \kappa} \tilde{\tau}. \tag{25}$$

Звідси видно, що за тих самих значень довжини вільного пробігу та середньої квадратичної швидкості відношення часу релаксації розглянутого процесу у випадку $\kappa = 1$ до часу релаксації одноатомного газу наближено дорівнює 0,66.

3. Висновки

Отже, досліджено модельну систему у просторово однорідному випадку. У першому наближенні за концентрацією отримано аналітичний вираз для температури як функції часу у випадку нерівномірного початкового розподілу за ступенями вільності. Показано, що відповідне кінетичне рівняння для “поступальної” (“обертальної”) температури (як усередненого моменту імпульсу (або обертального моменту)) з максвеллівсько-подібною функцією розподілу, при нерівномірному початковому розподілі енергії за ступенями вільності, має аналітичний розв’язок.

Знайдено, що із зменшенням різниці між початковою середньою поступальною (обертальною) енергією

Т а б л и ц я. Час релаксації

μ , г/моль	L/a	T , К	κ	тип молек.	τ , с
16	10^3	300	1	сфера	$1,70 \cdot 10^{-8}$
16	10^3	300	2,5	куля	$2,10 \cdot 10^{-8}$
720	10^3	300	1	сфера	$1,15 \cdot 10^{-7}$
720	10^3	300	2,5	куля	$1,41 \cdot 10^{-7}$
720	10^4	300	2,5	куля	$1,41 \cdot 10^{-6}$
16	10^4	300	10	куля з важким ядром	$4,30 \cdot 10^{-7}$
720	10^4	300	10	куля з важким ядром	$2,99 \cdot 10^{-6}$

та рівноважною, а також із зростанням рівноважної температури, час релаксації зменшується. Показано, що час релаксації середньої поступальної (обертальної) енергії до рівноважного значення обернено пропорційний кореню квадратному від рівноважної температури та обернено пропорційний концентрації частинок. Для власного моменту інерції, що дорівнює моменту інерції сферичної частинки з ефективним радіусом, час релаксації набуває мінімального значення.

Для даних температури та концентрації відношення характерного часу релаксації системи шорстких кульок τ_{\bullet} до часу релаксації системи шорстких сфер τ_{\circ} більше одиниці і дорівнює 1,23.

1. S. Chapman and T.G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases* (Cambridge University Press, Cambridge, 1960).
2. H. Grad, *Commun. Pure Appl. Math.* **2**, 331 (1949).
3. С. Де Гроот, П. Мазур, *Неравновесная термодинамика* (Мир, Москва, 1964).
4. I. Muller and T. Ruggeri, *Extended Thermodynamics* (Springer, New York, 1992).
5. D. Jou, J. Casas-Vazquez, and G. Lebon, *Extended Irreversible Thermodynamics* (Springer, Berlin, 1993).
6. В.С. Еу, *Kinetic Theory and Irreversible Thermodynamics* (Wiley, New York, 1992).
7. S. Luding S, M. Huthmann, S. McNamara, and A. Zippelius, *Phys. Rev. E* **58**, 3416 (1998).
8. G.S. Singh and B. Kumar, *Phys. Rev. E* **62**, 7927 (2000).
9. C. Cercignani and M. Lampis, *J. Stat. Phys.* **53**, 655 (1988).
10. C. Boursier, J. Menard, and F. Menard-Bourcin, *J. Phys. Chem. A* **111**, 7022 (2007).
11. Sh. Green, *J. Chem. Phys.* **62**, 2271 (1975).
12. A. Sizhuk and S. Yezhov, *Ukr. J. Phys.* **50**, 1397 (2005).
13. А.С. Сіжук, Вісник Київського університету. Серія фіз.-мат. науки № 3, 347 (2004).
14. А.С. Сіжук and S.M. Yezhov, *Visn. Kyiv. Univ. Ser. Fiz. Mat. Nauky* N 3, 591 (2005).
15. A. Sizhuk and S. Yezhov, *Ukr. J. Phys.* **50**, 1193 (2005).
16. А.С. Сіжук, С.М. Єжов, Вісник Київського університету. Серія фіз.-мат. науки № 3, 596 (2005).
17. В.І. Лев and P.M. Tomchuk, *Theor. Math. Phys.* **32**, 101 (1977).
18. Л.Д. Ландау, *ЖЭТФ* **7**, 203 (1937).
19. А.І. Sokolovsky, V.N. Gorev, and Z.Yu. Chelbaevsky, *Probl. At. Sci. Technol.* N 1, 230 (2012).
20. G.S. Bisnovatyi-Kogan, *Zh. Prikl. Mekh. Tekhn. Fiz.* N 3, 74 (1965).
21. V.I. Karas' and I.F. Potapenko, *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.* **46**, 307 (2006).
22. V.Ya. Rudyak and A.A. Belkin, in *Abstracts of the 3-rd International Conference "Physics of liquid matter: modern problems"* (Kyiv, Ukraine, 2005), p. 57.

Одержано 15.03.12

РЕЛАКСАЦІЯ ПРОСТРАНСТВЕННО ОДНОРОДНОЙ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПРИ УСЛОВИИ НЕОДНОРОДНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭНЕРГИИ

А.С. Сіжук, С.М. Єжов

Резюме

Исследована релаксація модельної системи з використанням кінетичного рівняння. В просторово однорідному випадку, а також максвелловської функції розподілу з неоднорідним розподілом енергії по степеням свободи (вращательних і поступальних), в першому наближенні по концентрації знайдено вираження для температури як функції часу. Показано, що з зменшенням різниці між початковою середньою поступальною енергією і її рівноважним значенням, а також зростом рівноважної температури, час релаксації зменшується. Знайдено, що час релаксації середньої поступальної (вращательної) енергії до рівноважного значення обернено пропорційно корню квадратному від рівноважної температури і обернено пропорційно концентрації частинок. Для власного моменту інерції, рівного моменту інерції сферическої частинки з ефективним радіусом, значення часу релаксації приймає мінімальне значення. Отримані часи релаксації для визначених параметрів частинок системи.

RELAXATION OF SPATIALLY UNIFORM DISTRIBUTION FUNCTION IN THE CASE OF NON-UNIFORM ENERGY DISTRIBUTION

A.S. Sizhuk¹, S.M. Yezhov²

¹Texas A&M University, Physics Department
(College Station, Tx 77843, USA;
e-mail: cannabiss@mail.univ.kiev.ua)

²Taras Shevchenko National University of Kyiv,
Faculty of Physics
(4, Prosp. Academician Glushkov, Kyiv 01601, Ukraine;
e-mail: yezhov@univ.kiev.ua)

Summary

Relaxation processes in a model system are studied with the use of a kinetic equation. In a first approximation with respect to the concentration, an expression for the temperature as a function of the time has been derived in the spatially uniform case and for the Maxwell distribution function with a non-uniform energy distribution over the rotational and translational degrees of freedom. The relaxation time is shown to decrease, as the difference between the initial and equilibrium values of average translational kinetic

energy diminishes and the equilibrium temperature grows. The time of the average translational (rotational) energy relaxation to the equilibrium value is found to be reciprocal to the square root of the equilibrium temperature and to the particle concentration.

For the intrinsic moment of inertia, which is equal to the moment of inertia of a spherical particle with certain effective radius, the relaxation time is minimal. Relaxation times for some parameters of particles in the system concerned are calculated.