UDK: 530.1(075,8)+539.2 **DOI: 10.56292/SJFSU/vol29_iss1/a213**

IKKI ATOMLI GAZLARDA TEBRANMA-ILGARILANMA ENERGIYA ALMASHINISH EHTIMOLLIGINI HISOBLASH

РАСЧЕТ ВЕРОЯТНОСТИ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ПОБУДИТЕЛЬНОГО ОБМЕНА ЭНЕРГИЕЙ В ДВУХАТОМНЫХ ГАЗАХ

CALCULATION OF THE PROBABILITY OF VIBRATIONAL-PROMOTIONAL ENERGY EXCHANGE IN DIATOMIC GASES

Samatov G‘ulom Bozorboyevich[1], Mo‘minjonov Sodiq[2]

[1]Samatov G‘ulom Bozorboyevich – Guliston davlat universiteti, Fizika-matematika fanlari nomzodi

[2]Mo‘minjonov Sodiq – Guliston davlat universiteti, Fizika yo‘nalishi magistranti

Annotasiya

Maqolada ikki atomli gazlarda tebranma relaksatsiya nazariyasi qaralgan. Tebranma-ilgarilanma energiya almashinish ehtimolligini hisoblashda, yakkalangan binar to‘qnashuvlar mexanizmiga asoslanilgan. Ushbu mexanizmga tayangan holda azot gazida tebranma-ilgarilanma relaksatsiya jarayoni o‘rganilgan va azot gazi uchun almashinish ehtimolligi ma’lum tempyeratura intervalida hisoblangan hamda energiya almashinish ehtimolligining temperaturaga bog‘lanishi o‘rganilgan.

Аннотация

В статье рассмотрены теории колебательной релаксации в двухатомных газах. При вычислении вероятности колебательно-поступательного энергия обмена основывались на механизму бинарных столкновений, На основе механизма бинарных столкновений изучены процессы колебательно-поступательной релаксации и вычислены вероятности энерго-обмена, а также зависимость вероятности обмена от температуры.

Abstract

The article considers theories of vibrational relaxation in diatomic gases. When calculating the probability of vibrational-translational energy exchange, we based on the mechanism of binary collisions. On the basis of the mechanism of binary collisions, the processes of vibrational-translational relaxation were studied and the probabilities of energy exchange were calculated, as well as the dependences of the probability of exchange from temperature.

***Kalit so‘zlar**. Relaksatsiya, erkinlik darajasi, ilgarilanma harakat, tebranma harakat, tebranma relaksatsiya, ikki atomli gazlar, tebranma-ilgarilanma relaksatsiya, binar to‘qnashuvlar, Maksvell taqsimoti, Energetik sig‘im.*

***Ключевые слова.** Релаксация, степень свободы, поступательное движение, колебательное движение, колебательная релаксация, двухатомные газы, колебательная-поступательная релаксация, бинарные столкновения, распределения Максвелла, Энергетический емкость.*

***Key words**. Relaxation, degree of freedom, translational motion, vibrational motion, vibrational relaxation, diatomic gases, vibrational-translational relaxation, binary collisions, Maxwell distributions, Energy capacity.*

KIRISH

Gazlarda molekulalarning o‘zaro to‘qnashish jarayonida energiya almashinish jarayonlarini qaraymiz. Molekulalarning o‘zaro to‘qnashishlarida ularning tebranma va aylanma holatlari o‘zgaradi. Bu o‘zgarishlarda ichki nergiyaning ortishi (aktivatsiya) yoki ichki energiyaning kamayishi (dezaktivatsiya) sodir bo‘ladi. Ilgarilanma harakat energiyasining kamayishi yuz beradi va ilgarilanma harakat teskariga o‘zgarishi (VRT-jarayonlar). Agar tebranma o‘tishlarda molekulalarning aylanma holati yetarlicha kichik o‘zgarsa, bu jarayonlar tebranma va ilgarilanma energiyalarning almashinish jarayonlari VT-jarayonlar deyiladi [1,3]. VRT va VT-jarayonlar ikki atomli molekulaning bir atomli molekula bilan to‘qnashish jarayonida sodir bo‘ladi.

Gazlarda molekulalarning tebranma harakat erkinlik darajalari bo‘yicha energiyaning muvozanatli (yoki stasionar) taqsimotining o‘rnatilishiga tebranma relaksatsiya deb ataladi.

Tebranma relaksatsiyaning ilgarilanma va aylanma relaksatsiyadan ajratib turuvchi ikkita muhim hususiyatini ta’kidlaymiz.

Birinchidan, tebranma harakat erkinlik darajalarining energetik sig‘imi ilgarilanma va aylanma harakat erkinlik darajalarining energetik sig‘imiga nisbatan katta [2].

Ikkinchidan, o‘rtacha erkin yugirish vaqti masshtabida tebranma relaksatsiya-juda sekin jarayon hisoblanadi. Ta’kidlash kerakki, ba’zi xollarda tebranma relaksatsiyani kimyoviy reaksiyalarga nisbatan tez o‘tadigan jarayon deb qarash mumkin. Xulosa qilib aytish mumkinki, birinchi yaqinlashishda tebranma relaksatsiyani yakkalangan holda qarash mumkin. Bu vaqt ichida aylanma va ilgarilanma erkinlik darajalari bo‘yicha muvozanat holat o‘rnatilgan, ya’ni ilgarilanma va aylanma relaksatsiya jarayonlari tugagan kimyoviy reaksiyalar esa hali boshlanmagan bo‘ladi.

O‘LCHASH METODLARI VA OLINGAN NATIJALAR MUHAKAMASI

Yuqoridagilarni e’tiborga olib, ushbu maqolada ikki atomli gazlarda tebranma-ilgarilanma energiya almashinish ehtimolligini ko‘rib chiqamiz.

Tebranma relaksatsiyani taqqoslanarli darajada sekin jarayon ekanligi uning molekulyar kinetikada uning yuqori darajadagi rolini belgilab beradi. Tebranma relaksatsiya Gersfeld va Rays g‘oyalari keyinchalik Knezer, Ziner, Landau va Teller tomonidan o‘rganilib rivojlantirilgan.

Endi tebranma relaksatsiya vaqtini hisoblash masalasiga o‘tamiz. Tebranma relaksatsiya vaqtini baholash maqsadida quyidagi sistemani qaraymiz. A – inert gaz atomlaridan iborat sistema (inert gaz atomi massasi m_A zarrachalar soni zichligi N_A) gaz tarkibiga relaksatsiyalanuvchi N_{BC} molekulalar aralashtirilgan. (Molekula massasi $m_B + m_C$, zarrachalar soni zichligi N_{BC} N_{BC} << N_A) Hamma zarrachalarning massa markazlarining ilgarilanma harakati tezliklari T - temperaturali Maksvell taqsimotiga ega. Molekulalarning tebranma harakat energiyalarining boshlang‘ich taqsimoti ixtiyoriy. Faraz qilamiz, bu sistemada tebranma harakat yenergiyasi ε_V sodda relaksasion tenglama bilan ifodalanadi.

$$\frac{d\varepsilon_V}{dt} = -\frac{\varepsilon_V - \varepsilon_V^0}{\tau_{VT}} \quad (1)$$

Bu yerda ε_V -tebranma harakat energiyasining muvozanat holatdagi qiymati. Energiyaning ε_V va ε_V^0 qiymatlari birlik hajm uchun hisoblanadi. (1) tenglama tebranma relaksatsiya vaqti τ_{VT} ni aniqlaydi.

$$\tau_{VT} = \frac{\varepsilon_V^0}{\frac{d\varepsilon_V}{dt}} \Big| \varepsilon_V = 0 \quad (2)$$

Garmonik ossillyator modeli uchun

$$\varepsilon_V^0 = \hbar\omega N_{BC}\left[\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1\right]^{-1} \quad (3)$$

$\left.\frac{d\varepsilon_V}{dt}\right|_{\varepsilon_V=0}$ kattalik quyidagi ifodadan topiladi.

$$\left.\frac{d\varepsilon_V}{dt}\right|_{\varepsilon_V=0} = N_{BC}\int \Delta E_V dZ(\upsilon) \quad (4)$$

Bu yerda $dZ(\upsilon) = \mathrm{N_A} d_{\mathrm{AB}}^2 (2\pi)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu}{k\mathrm{T}}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left\{-\frac{\mu\upsilon^2}{2k\mathrm{T}}\right\} \upsilon^3 d\upsilon$ - birlik vaqtda BC molekulalarning A atom bilan massa markazlari nisbiy tezligining $\upsilon, \upsilon + d\upsilon$ intervalidagi to‘qnashishlar sonini ifodalaydi [1-2].

O‘zaro to‘qnashayotgan molekulalarning molekulalarning keltirilgan massasi

$$\mu = \frac{m_{\mathrm{A}}(m_{\mathrm{B}} + m_C)}{(m_{\mathrm{A}} + m_{\mathrm{B}} + m_C)}$$ ga teng.

$\Delta \mathrm{E}_V - \upsilon$ nisbiy tezlik bilan harakatlanayotgan A atom bilan tebranma erkinlik darajalari uyg‘onmagan BC molekulaga bitta to‘qnashishda uzatilayotgan energiya. (4) ifodani quyidagicha ifodalash qulay. [12-15].

$$\left.\frac{d\varepsilon_V}{dt}\right|_{\varepsilon_V = 0} = \mathrm{N}_{BC} \int \Delta \mathrm{E}_V dZ(\upsilon) \qquad (5)$$

Bu yerda $Z - BC$ molekulaning birlik vaqtdagi to‘la to‘qnashishlar soni.

$$\Delta \mathrm{E}_V = \mathrm{Z}^{-1} \int \Delta \mathrm{E}_V dZ(\upsilon), \qquad (6)$$

$\varepsilon_V = 0$ relaksatsiya vaqti uchun (2 – 6) larni hisobga olib quyidagi ifodani olamiz

$$\tau_{VT} = \left[Z \frac{\overline{\Delta \mathrm{E}_V}}{\hbar\omega} \left(exc \frac{\hbar\omega}{k\mathrm{T}} - 1 \right) \right]^{-1} \qquad (7)$$

$$\overline{\Delta \mathrm{E}_V} = \hbar\omega \mathrm{P}_{01} \quad (8)$$

To‘g‘ri P_{01} va teskari o‘tish P_{10} ehtimolliklari detal muvozanat prinsipi bilan quyidagicha bog‘langan.

$$\mathrm{P}_{01} = \mathrm{P}_{10} \exp\left\{-\frac{\hbar\omega}{k\mathrm{T}}\right\} \quad (9)$$

ni e’tiborga olib tebranma redaksasiya vaqti uchun quyidagi ifodani olamiz.

$$\tau_{VT} = \left[\mathrm{ZP}_{10} \left(1 - \exp\left\{-\frac{\hbar\omega}{k\mathrm{T}}\right\} \right) \right]^{-1} \qquad (10)$$

$\overline{\Delta \mathrm{E}_V}$ - yoki P_{0n} ni aniqlash uchun atomning ossillyator bilan to‘qnashishi to‘g‘risidagi dinamik masala yechilishi kerak va $\Delta \mathrm{E}_V(\upsilon)$ topiladi. Soddalashtirish maqsadida, tebranma harakat energiyasini uzatish uchun eng qulay bo‘lgan to‘qnashish konfigurasiyasini qarab chiqamiz. A atomning BC molekula bilan to‘qnashishini birinchi yaqinlashishda ossilyatorga $F(t)$ g‘alayonlantiruvchi kuchning ta’siri sifatida qaraymiz [1,2,4,8].

Ossillyatorning, massa markazi sanoq sistemasiga nisbatan, majburlovchi $F(t)$ kuch ta’siridagi harakatini ifodalovchi harakat tenglamasini quyidagicha yozamiz:

$$\ddot{y} + \omega^2 y = \frac{1}{m} F(t) \quad (11)$$

Uzatilgan (berilgan) ΔE_V energiyaning qiymati quyidagi ifodadan aniqlanadi.

$$\Delta E_V = \frac{m}{2}\left(\dot{y}^2 + \omega^2 y^2\right) \Big| t \Rightarrow \infty \quad (12)$$

(12) ifoda umumiy holda ham integrallanishi mumkin buning uchun (12.) ni quyidagi ko‘rinishda qayta yozamiz.

$$\frac{d}{dt}\left(\dot{y} + i\omega \quad y\right) - i\omega\left(\dot{y} + i\omega y\right) = \frac{1}{m}F(t) \quad (13)$$

(13) ning yechimini aniqlab, ΔE_V uchun quyidagi ifodani olamiz

$$\Delta E_V = \frac{m}{2}\left(|\xi|^2\right) \Big| t \Rightarrow \quad \text{yoki} \quad \Delta E_V = \frac{1}{2m}\left|\int_{-\infty}^{\infty} F(t) e^{-i\omega t} dt\right|^2 \quad (14)$$

Shunday qilib berilgan energiya $F(t)$ kuchning chastotasi sistemaning xususiy chatotasiga teng bo‘lgan Fure komponentasi kvadratining moduli bilan aniqlanar ekan. Boshqacha qilib aytganda, chastotasi sistemaning xususiy chastotasiga teng bo‘lgan, Fure komponentagina tebranma erkinlik darajalarini g‘alayonlantirish (uyg‘otish) uchun samarali bo‘lar ekan. ΔE_V ni xisoblash uchun $F(t)$ kuchning aniq ko‘rinishini aniqlovchi molekulalararo o‘zaro ta’sir potensialining ko‘rinishini konkretlashtirish zarur.

Hisoblashlar natijasida $\Delta E_V \approx \exp\{-2\omega\tau_{CT}\}$ (15) ko‘rinishda aniqlanadi. $\omega\tau_{CT} >> 1$ (16) $\omega\tau_{CT}$ kattalik adiabatik faktor bilan mos keladi. Demak molekulalarning tebranma erkinlik darajalarining g‘alayonlanish (uyg‘onish) jarayoni ko‘pchilik molekulalar uchun adiabatik to‘qnashishlarda bo‘ladi. Bu holda tebranma erkinlik darajalariga beriladigan energiya umumiy nazariyaga asosan eksponensial kichik natija bo‘ladi. ΔE_V ni molekulalar aro o‘zaro ta’sir uchun aniq hisoblashlar $V = C\exp(-ar_{AB})$ (17)

Bu yerda $r_{AB} = R - \lambda Y$ - A va B atomlarning massa markazlari orasign masofa. Bu holda:

$$F(t) = -a\frac{\mu\upsilon^2}{2}\frac{m_C}{m_B + m_C} Sch^2 \frac{a\upsilon t}{2}, \quad (18)$$

ΔE_V uchun esa quyidagi ifoda olinadi

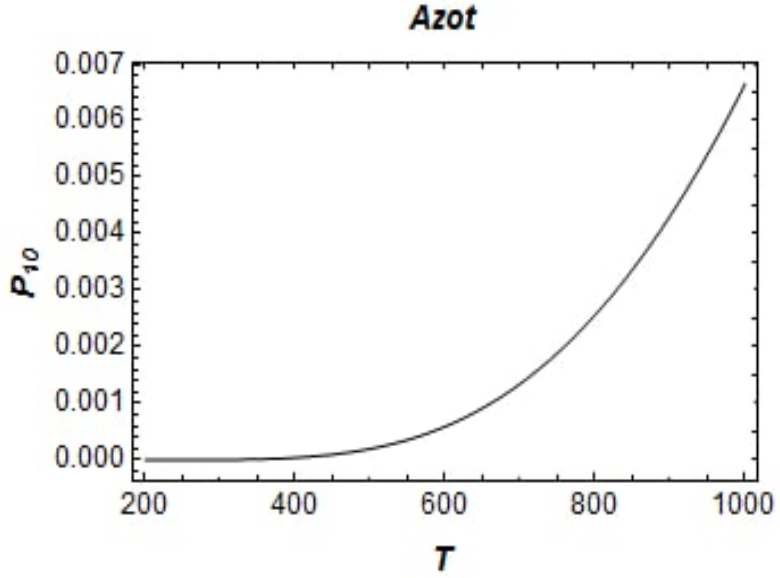
$$\Delta E_V = \frac{a^2\mu^2\upsilon^4}{\left(m_B + m_C\right)^2 8m}\left(\frac{4\pi\omega}{a^2\upsilon^2}\frac{1}{sh\dfrac{\pi\omega}{a\upsilon}}\right)^2 \quad (19)$$

ifoda $\frac{\pi\omega}{a\upsilon} >> 1$ shart bajarilganda $\Delta E_V = \frac{8\pi^2\omega^2\mu^2 m_C^2}{\left(m_B + m_C\right)^2 a^2 m}\exp\left\{-\frac{2\pi\omega}{a\upsilon}\right\}$ (20) ifodaga o‘tadi. [1-5].

Gazlarda tebranma relaksatsiyaning, VT-almashinish ehtimolligini hisoblash formulasi umumiy ko‘rinishda quyidagicha yoziladi.

$$P_{10}=8P_0P_CV_{10}^2\left(\frac{\pi}{3}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\frac{2\pi\mu\omega}{\alpha^2\hbar}\right]^2\chi^{\frac{1}{2}}\exp\left[-\left(3\chi-\frac{\hbar\omega}{2rT}-\frac{\varepsilon}{\kappa T}\right)\right] \quad (21)$$

(21) formula asosida VT- ilgarilanma – tebranma energiya almashinish ehtimolligini hisoblaymiz. Natijada ilgarilanma – tebranma energiya almashinish ehtimolligining temperaturaga bog‘lanish grafigini azot gazi uchun chizish mumkin. (Rasm.1).

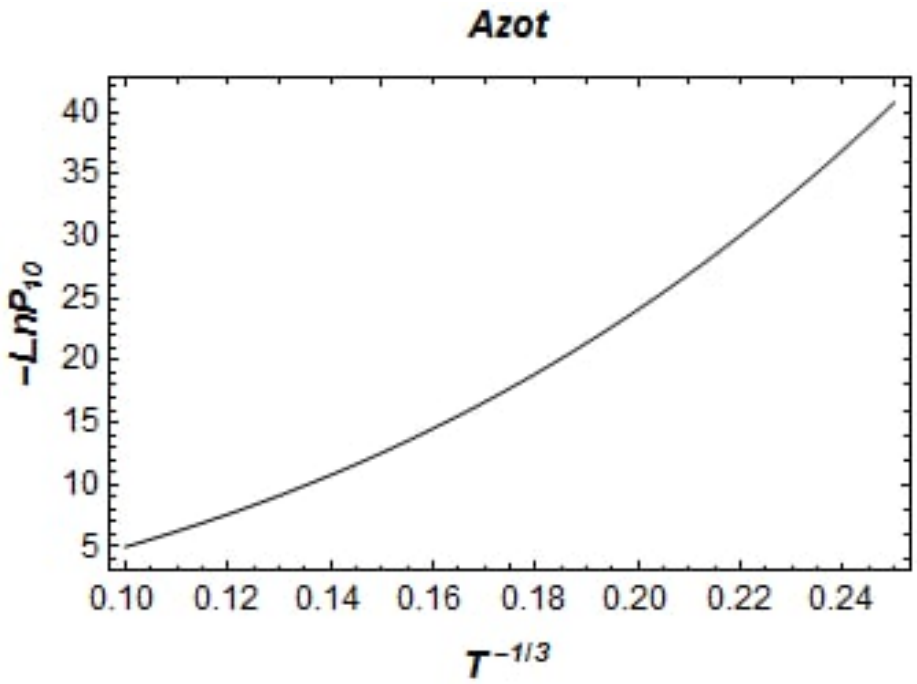


Rasm 1. Gazlarning ilgarilanma-tebranma energiya almashinish ehtimolligining tempuraturaga bog‘lanish grafigi.

Ko‘rinib turibdiki bog‘lanish grafigi egri chiziqdan iborat. Ma’lumki temperaturaviy bog‘lanishning ko‘rinishi asosan (21) formuladagi $\exp(-3\chi)$ bilan aniqlanadi.[2,3,6-8]

$$\chi=\left(\frac{\pi^2\mu\omega^2}{2\alpha^2\kappa\mathrm{T}}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (22)$$

Agar LnP_{10} ning $\mathrm{T}^{-\frac{1}{3}}$ bog‘lanish grafigini chizsak bog‘lanish to‘g‘ri chiziqdan iborat bo‘ladi. (Rasm.2).



Rasm.2 Gazlarning tebranma-ilgarilanma energiya almashinish ehtimolligining tempuraturaga bog‘lanish grafigi.

XULOSA

Xulosa qilish mumkinki, azot gazi uchun ham tebranma-ilgarilanma energiya almashinish ehtimolligi LnP_{10} ning $T^{-\frac{1}{3}}$ ga bog‘lanishi to‘g‘ri chiziqdan iboratligini ifodalaydi va bu natija Landau- Teller tomonidan olingan natijani tasdiqlaydi.

Qaralayotgan temperatura intervalida olingan natijalar gazlarda tebranma relaksatsiya vaqtining ham $T^{-\frac{1}{3}}$ ga bog‘lanishining to‘g‘ri xisoblanganligini ko‘rsatadi.

ADABIYOTLAR RO‘YXATI

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика,М.Наука,1986.

2. Гордиец Б. Ф.Осипов А.И., Шелепин Л.А. Кинетические процессы в газах и молекулярные лазеры.- М.Наука, 1980 г.

3. Ступоченко Е.Е., Лосев С.А., Осипов А.И., Релаксационные процессы в ударных волнах, - М.Наука,1965.

4.Никитин Е.Е. Теория элементарных атомно - молекулярных процессов в газах. – Химия,1990г.

5, Никитин Е.Е., Осипов А.И. Колебательная релаксация в газах. - М. ВИНИТИ, 1987г..

6. Семиохин И.А., Страхов Б.В, Осипов А.И. Кинетика химических реакций .- М. МГУ,1995, 351 с.,

7. Воскобойников Ю.Е., Задорожный А.Ф., Литвинов Л.А., Черный Ю.Г., Основы вычислений и программирования,Новосибирск,2012, 218 с.

8. Осипов А.И., Саматов Г.Б. О механизме колебательной релаксации в жидкостях.- Ж.физ.химия,1991,т,55,№5,1186-1189,