

IKKI ATOMLI GAZLARDA TEBRANMA-ILGARILANMA ENERGIYA ALMASHINISH
EHTIMOLLIGINI HISOBLASHРАСЧЕТ ВЕРОЯТНОСТИ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ПОБУДИТЕЛЬНОГО ОБМЕНА
ЭНЕРГИЕЙ В ДВУХАТОМНЫХ ГАЗАХCALCULATION OF THE PROBABILITY OF VIBRATIONAL-PROMOTIONAL ENERGY
EXCHANGE IN DIATOMIC GASESSamatov G'ulom Bozorboyevich¹, Mo'minjonov Sodiq²¹Samatov G'ulom.Bozorboyevich– Guliston davlat universiteti, Fizika-matematika
fanlari nomzodi²Mo'minjonov Sodiq– Guliston davlat universiteti, Fizika yo'nalishi
magistranti**Annotasiya**

Maqolada ikki atomli gazlarda tebranma relaksatsiya nazariyasi qaralgan. Tebranma-ilgarilanma energiya almashinish ehtimolligini hisoblashda, yakka bina to'qnashuvlar mexanizmiga asoslanilgan. Ushbu mexanizmga tayangan holda azot gazida tebranma-ilgarilanma relaksatsiya jarayoni o'rganilgan va azot gazi uchun almashinish ehtimolligi ma'lum temperatura 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 механизме 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, bina 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 molekularning o'zaro to'qnashish jarayonida energiya almashinish jarayonlarini qaraymiz. Molekularning o'zaro to'qnashishlarida ularning tebranma va aylanma holatlari o'zgaradi. Bu o'zgarishlarda ichki energiyaning 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 molekularning 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 molekularning 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 xususiyatini ta'kidlaymiz.

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

Ikkinchidan, o'rtacha erkin yugirish vaqti masshtabida tebranma relaksatsiya-juda sekin jarayon hisoblanadi. Ta'kidlash kerakki, ba'zi hollarda tebranma relaksatsiyani kimyoviy reaksiyalarga nisbatan tez o'tadigan jarayon deb qarash mumkin. Xulosa qilib aytish mumkinki, birinchi yaqinlashishda tebranma relaksatsiyani yakkaolangan 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'LGHASH METODLARI VA OLINGAN NATIJALAR MUHOKAMASI

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} $N_{BC} \ll N_A$) 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 $\mathcal{E}_V$ sodda relaksasion tenglama bilan ifodalanadi.

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

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

$$\tau_{VT} = \frac{\mathcal{E}_V^0}{\left. \frac{d\mathcal{E}_V}{dt} \right|_{\mathcal{E}_V=0}} \quad (2)$$

Garmonik ossillyator modeli uchun

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

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

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

Bu yerda $dZ(\nu) = N_A d_{AB}^2 (2\pi)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu}{kT}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left\{-\frac{\mu\nu^2}{2kT}\right\} \nu^3 d\nu$ - birlik vaqtda BC

molekulalarning A atom bilan massa markazlari nisbiy tezligining $\nu, \nu + d\nu$ intervalidagi to'qnashishlar sonini ifodalaydi [1-2].

O'zaro to'qnashayotgan molekulalarning molekulalarning keltirilgan massasi

$$\mu = \frac{m_A(m_B + m_C)}{(m_A + m_B + m_C)} \text{ ga teng.}$$

$\Delta E_\nu - \nu$ 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].

$$\left. \frac{d\varepsilon_\nu}{dt} \right|_{\varepsilon_\nu=0} = N_{BC} \int \Delta E_\nu dZ(\nu) \quad (5)$$

Bu yerda Z – BC molekulaning birlik vaqtdagi to'la to'qnashishlar soni.

$$\Delta E_\nu = Z^{-1} \int \Delta E_\nu dZ(\nu), \quad (6)$$

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

$$\tau_{VT} = \left[Z \frac{\overline{\Delta E_\nu}}{\hbar\omega} \left(\exp \frac{\hbar\omega}{kT} - 1 \right) \right]^{-1} \quad (7)$$

$$\overline{\Delta E_\nu} = \hbar\omega P_{01} \quad (8)$$

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

$$P_{01} = P_{10} \exp \left\{ -\frac{\hbar\omega}{kT} \right\} \quad (9)$$

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

$$\tau_{VT} = \left[Z P_{10} \left(1 - \exp \left\{ -\frac{\hbar\omega}{kT} \right\} \right) \right]^{-1} \quad (10)$$

$\overline{\Delta E_\nu}$ - yoki P_{0n} ni aniqlash uchun atomning ossilyator bilan to'qnashishi to'g'risidagi dinamik masala yechilishi kerak va $\Delta E_\nu(\nu)$ topiladi. Soddalashtirish maqsadida, tebranma harakat energiyasini uzatish uchun eng qulay bo'lgan to'qnashish konfiguratsiyasini 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].

Ossilyatorning, 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_ν energiyaning qiymati quyidagi ifodadan aniqlanadi.

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

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

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

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

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

Shunday qilib berilgan energiya $F(t)$ kuchning chastotasi sistemaning xususiy chastotasiga 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 hisoblash 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.

$\omega\tau_{CT} \gg 1$ (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 molekulalararo 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 orasidagi masofa. Bu holda:

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

ΔE_V uchun esa quyidagi ifoda olinadi

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

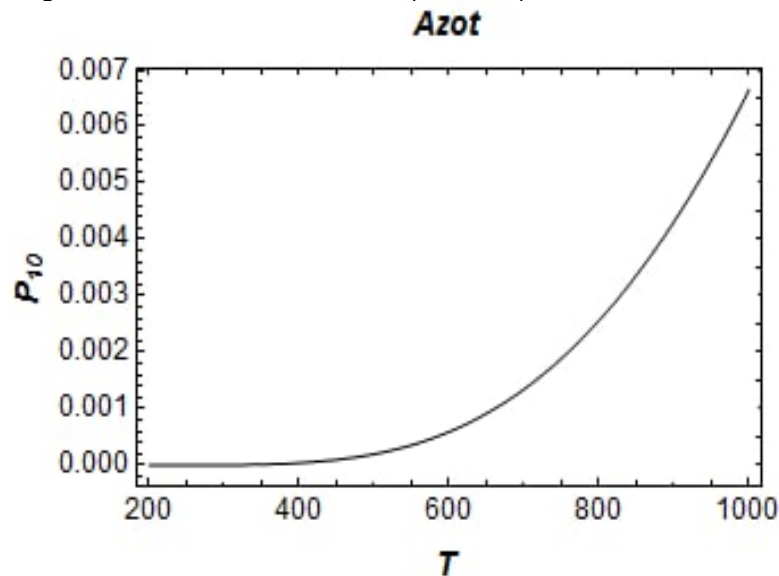
ifoda $\frac{\pi\omega}{av} \gg 1$ shart bajarilganda $\Delta E_V = \frac{8\pi^2 \omega^2 \mu^2 m_C^2}{(m_B + m_C)^2 a^2 m} \exp\left\{-\frac{2\pi\omega}{av}\right\}$ (20) ifodaga

o'tadi. [1-5].

Gazlarda tebranma relaksatsiyaning, VT-almashinish ehtimoligini hisoblash formulasi umumiy ko'rinishda quyidagicha yoziladi.

$$P_{10} = 8P_0 P_C V_{10}^2 \left(\frac{\pi}{3} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\frac{2\pi\mu\omega}{\alpha^2 \hbar} \right]^2 \chi^{\frac{1}{2}} \exp \left[- \left(3\chi - \frac{\hbar\omega}{2rT} - \frac{\varepsilon}{\kappa T} \right) \right] \quad (21)$$

(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).

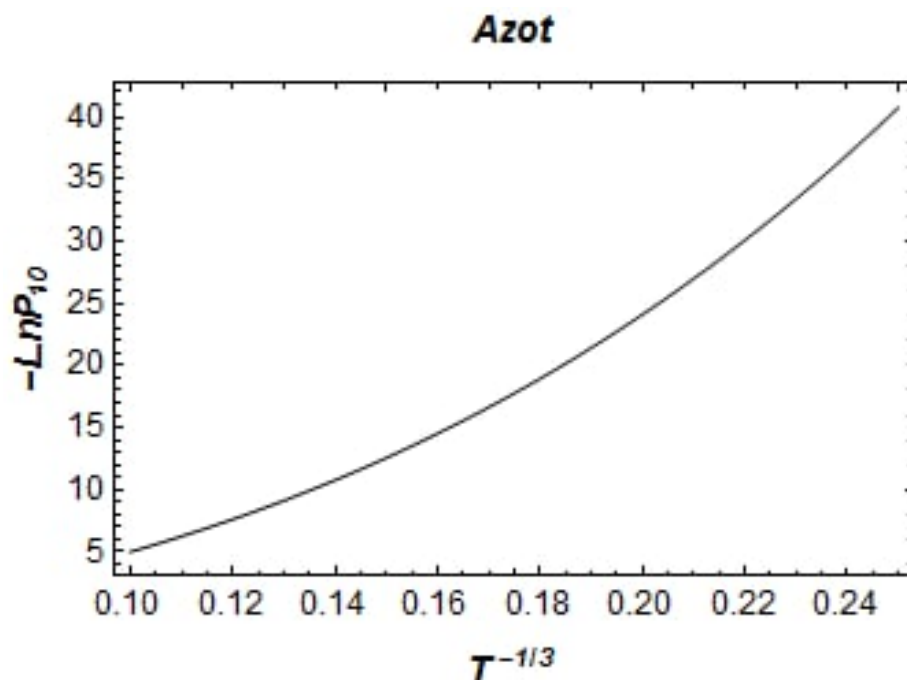


Rasm 1. Gazlarning ilgarilanma-tebranma energiya almashinish ehtimolligining temperaturaga bog‘lanish grafigi.

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]

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

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



Rasm.2 Gazlarning tebranma-ilgarilanma energiya almashinish ehtimolligining temperaturaga bog'lanish grafigi.

XULOSA

Xulosa qilish mumkinki, azot gazi uchun ham tebranma-ilgarilanma energiya almashinish

ehtimolligi $\ln P_{10}$ 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 hisoblanganligini 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. ВИНТИ, 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,