

ПРОГРАММА COLLISION ДЛЯ РАСЧЕТА Ω -ИНТЕГРАЛОВ ДЛЯ ПОТЕНЦИАЛА ШТОКМАЙЕРА

Лазарев А.В., Татаренко К.А., Трубников Д.Н., Черёмухин Е.А.¹

Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова,
Россия, 119991, Москва, ГСП-1, Воробьевы Горы, д.1.стр.3
¹e-mail: eachrem@gmail.com

Основная цель данной работы – расчет Ω -интегралов, используемых при теоретическом предсказании свойств полярных газов, межмолекулярное взаимодействие которых описывается потенциалом Штокмайера:

$$U(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 + \delta \left(\frac{\sigma}{r} \right)^3 \right], \quad (1)$$

где σ и ε - параметры, аналогичные параметрам потенциала Леннард-Джонса, δ -параметр дипольного взаимодействия.

В данной работе представлена программа COLLISION 1.0, предназначенная для расчетов приведенных Ω -интегралов для потенциала (1) в классическом приближении [1]:

$$\Omega^{(L,S)*}(T^*) = \frac{1}{\pi\sigma^2(S+1)!} \int_0^{+\infty} e^{-x} x^{S+1} Q_L^*(\varepsilon T^* x) dx, \quad (2)$$

$$Q_L^*(E) = \frac{4\pi}{[1+2L-(-1)^L]} \int_0^{+\infty} b(1-\cos^L \chi(b,E)) db,$$

$$\chi(b,E) = \pi - 2b \int_{r_m}^{+\infty} \frac{dr}{r^2 [F(r,b,E)]^{1/2}}, \quad F(r,b,E) = 1 - \frac{U(r)}{E} - \frac{b^2}{r^2},$$

где $T^* = kT/\varepsilon$ - приведенная температура, r_m - приведенный параметр, $Q_L^*(E)$ - приведенное сечение рассеяния, $\chi(b,E)$ - угол рассеяния. Преимуществами новой программы являются: контроль погрешности вычислений на всех этапах вычисления интегралов (2) за счет использования численного метода Кленша-Куртиса и специальных преобразований интегралов [2]. Сравнение с результатами работы [3] показало совпадение расчетов с приемлемой точностью.

Литература

1. Ферцигер Дж. Математическая теория процесса переноса в газах. – М.:Мир. 1975. 554 стр.
2. H.O'Hara, F.J.Smith. "The Efficient Calculation of the Transport Properties of a Dilute Gas to a Prescribed Accuracy" // J.Comp.Phys. V.5. 1970. Pp.328-344.
3. L.Monchick, E.A. Mason. "Transport Properties of Polar Gases" // J.Chem.Phys. V.35 N.5. 1961. Pp.1676-1697.