

稠密气体中的输运现象和方位 势氩的粘滞率和热导率

包 科 达

(北京大学物理系)

1982 年 4 月 29 日收到

提 要

建议用推广的恩斯柯克方程 (14), 讨论稠密气体中的输运现象. 指出空间关联函数 $Y(r)$ 可以从状态方程的维里展开求得.

文中给出了计算方位势稠密气体的粘滞率和热导率的公式以及计算关联函数的方法. 用得到的结果, 计算了温度为 173K 和 348K 的氩的粘滞率和温度为 183K 和 348K 的氩的热导率. 在高压区, 计算结果与实验测定的符合程度, 较之现有理论, 有明显的改进.

一、引 言

基于玻耳兹曼方程的稀薄气体动力论, 成功地解释了气体中的输运现象^[7,9,10,20]. 恩斯柯克 (Enskog)^[7,9,10] 首先考虑分子的有限体积, 修正玻氏方程, 讨论稠密气体的动力学性质. 恩氏方程为

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{k} \sigma^2 (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) \left[Y\left(\mathbf{r} + \frac{1}{2} \sigma \mathbf{k}\right) \right. \\ \cdot f(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t) f_1(\mathbf{r} + \sigma \mathbf{k}, \mathbf{v}_1', t) - Y\left(\mathbf{r} - \frac{1}{2} \sigma \mathbf{k}\right) \\ \left. \cdot f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) f_1(\mathbf{r} - \sigma \mathbf{k}, \mathbf{v}_1, t) \right], \end{aligned} \quad (1)$$

其中

$$\begin{aligned} Y\left(\mathbf{r} \pm \frac{1}{2} \sigma \mathbf{k}\right) = 1 + 0.4167 \pi \sigma^3 n \left(\mathbf{r} \pm \frac{1}{2} \sigma \mathbf{k}\right) \\ + 0.1275 \left[\pi \sigma^3 n \left(\mathbf{r} \pm \frac{1}{2} \sigma \mathbf{k}\right) \right]^2 + \dots \end{aligned} \quad (2)$$

是非平衡的关联函数.

恩斯柯克的理论在一定的气体密度范围之内, 与实验结果相符^[4-7,11], 例如对于惰性气体, 当 $bn < 0.4$ 时 ($b = \frac{2}{3} \pi \sigma^3$), 理论值对实验值的偏离不超过 10%. 为了改善更高密度时的理论值, 恩斯柯克建议用实验测得的 p, V, T 的数据来确定刚球分子的 σ , 再计

算输运系数的理论值, 这种方法称为“变形”的恩斯柯克理论 (MET)^[6-8]. MET 对于惰性气体能在 $bn \leq 0.6$ 范围内, 给出与实验基本一致的数值.

为了发展更为完整的稠密气体动力论, 一些物理学家^[13-17]以刘维方程作为非平衡态的统计理论的出发点, 得到了著名的 BBGKY 等级方程组

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} + \mathcal{H}_s f_s = \int dx_{s+1} \sum_{i=1}^s \hat{\Theta}_{i,s+1} f_{s+1} \quad (s = 1, 2, \dots, N). \quad (3)$$

当 $s = 1$ 和 2 时, 有

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{r}_1} = \int \frac{\partial \varphi_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \cdot \frac{\partial f_2}{\partial \mathbf{p}_1} d\mathbf{p}_2 d\mathbf{r}_2, \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_2}{\partial t} + \left(\frac{\mathbf{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial f_2}{\partial \mathbf{r}_1} + \frac{\mathbf{p}_2}{m} \cdot \frac{\partial f_2}{\partial \mathbf{r}_2} - \frac{\partial \varphi_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \cdot \frac{\partial f_2}{\partial \mathbf{p}_1} - \frac{\partial \varphi_{21}}{\partial \mathbf{r}_2} \cdot \frac{\partial f_2}{\partial \mathbf{p}_2} \right) \\ = \int \left(\frac{\partial \varphi_{13}}{\partial \mathbf{r}_1} \cdot \frac{\partial f_3}{\partial \mathbf{p}_1} + \frac{\partial \varphi_{23}}{\partial \mathbf{r}_2} \cdot \frac{\partial f_3}{\partial \mathbf{p}_2} \right) d\mathbf{p}_3 d\mathbf{r}_3, \end{aligned} \quad (5)$$

其中 $f_s(x_1, \dots, x_s)$ 为 s 个粒子的分布函数; $\mathcal{H}_s$ 为 s 个粒子的哈密顿算符, 即

$$\mathcal{H}_s = \sum_{k=1}^s \frac{\mathbf{p}_k}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_k} - \sum_{1 \leq i < j \leq s} \hat{\Theta}_{ij}, \quad (6)$$

而

$$\hat{\Theta}_{ij} = \left(\frac{\partial \varphi_{ij}}{\partial \mathbf{r}_i} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} + \frac{\partial \varphi_{ji}}{\partial \mathbf{r}_j} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_j} \right). \quad (7)$$

波戈留波夫证明^[13,14], 只要 s 个粒子的初始分布满足相关性减弱条件, 则由方程 (4) 可以得到一个广义的玻氏方程^[15-17,8]

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{r}} = \int d\mathbf{x}_2 \hat{\Theta}_{12} \hat{\mathcal{F}}_t(x_1, x_2) f_1(x_1, t) f_1(x_2, t) \\ + \iint d\mathbf{x}_2 d\mathbf{x}_3 \hat{\Theta}_{12} \hat{\mathcal{F}}_t(x_1, x_2 | x_3) \prod_{i=1}^3 f_i(x_i, t) + \dots, \end{aligned} \quad (8)$$

其中算符

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{F}}_t(x_1, \dots, x_s) = \hat{S}_t^{(s)}(x_1, \dots, x_s) A_s(x_1, \dots, x_s, 0) \prod_{i=1}^s \hat{S}_t^{(1)}(x_i) \\ (s = 1, 2, \dots, N), \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{F}}_t(x_1, x_2 | x_3) = \hat{\mathcal{F}}_t(x_1, x_2, x_3) - \hat{\mathcal{F}}_t(x_1, x_2) \hat{\mathcal{F}}_t(x_1, x_3) \\ - \hat{\mathcal{F}}_t(x_1, x_2) \hat{\mathcal{F}}_t(x_2, x_3) + \hat{\mathcal{F}}_t(x_1, x_2), \end{aligned} \quad (10)$$

而 $\hat{S}_t^{(s)} = e^{-i\mathcal{H}_t^{(s)}}$ 为 s 个粒子的位移算符; $A_s(x_1, \dots, x_s, 0)$ 为 s 个粒子的初始分布的关联函数. $\mathbf{x} = (\mathbf{r}, \mathbf{p})$.

已经证明^[15,16], 若忽略初始态粒子之间的相关性; 并设体系过程的特征时间远大于完成一次碰撞所需时间, 则由 (8) 式右边第一项可得

$$\begin{aligned} I = \int d\mathbf{p}_2 \int_0^\infty b db \int_0^{2\pi} d\varepsilon \frac{|\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1|}{m} [f_1(\mathbf{R}_1, \mathbf{p}'_1, t) f_1(\mathbf{R}_2, \mathbf{p}'_2, t) \\ - f_1(\mathbf{R}_1, \mathbf{p}_1, t) f_1(\mathbf{R}_2, \mathbf{p}_2, t)], \end{aligned} \quad (11)$$

其中

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_1 &= \hat{S}_{-i}^{(2)}(x_1, x_2) \hat{S}_i^{(1)}(x_1) \hat{S}_i^{(1)}(x_2) \mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_1 - \frac{1}{2} \mathbf{r}_{21} + \frac{1}{2} \Delta \mathbf{r}_{21}, \\ \mathbf{R}_2 &= \hat{S}_{-i}^{(2)}(x_1, x_2) \hat{S}_i^{(1)}(x_1) \hat{S}_i^{(1)}(x_2) \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1 - \frac{1}{2} \mathbf{r}_{21} - \frac{1}{2} \Delta \mathbf{r}_{21}, \end{aligned} \quad (12)$$

$$\text{而} \quad \Delta \mathbf{r}_{21} = \hat{S}_{-i}^{(2)}(x_1, x_2) \hat{S}_i^{(1)}(x_1) \hat{S}_i^{(1)}(x_2) \mathbf{r}_{21}. \quad (13)$$

显然 $\mathbf{R} = \mathbf{r}_1 - \frac{1}{2} \mathbf{r}_{21}$ 为两粒子的质心坐标, $\mathbf{r}_{21}$ 为它们之间的相对坐标 (见图 1). 图 2 为 $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ 与 $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2$ 之间关系的示意图.

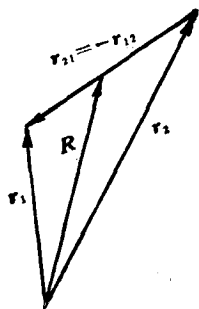


图 1 两体碰撞中的质心坐标和相对坐标

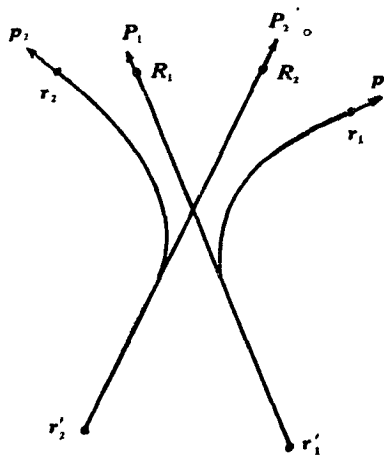


图 2 算符 $\mathcal{S}_i(x_1, x_2)$ 对 $\mathbf{r}_{21}$ 作用示意图

可以看出, 只要认为在相互作用半径范围内 $\mathbf{r}_{21} = 0$, 则 $\mathbf{R}_1 = \mathbf{R}_2 = \mathbf{r}_1$, (11) 式就变为玻氏方程的碰撞积分. 对直径 σ 的刚球分子, 引进初始粒子分布的相关函数 $Y(\mathbf{r} \pm \sigma \mathbf{k})$, 由方程 (11) 就可以得到恩氏方程的碰撞积分.

Alder 等人^[18]用计算机模拟计算了 $N = 108$ 的刚性球流体的输运系数, 结果表明, 恩斯柯克理论计算值, 在 $n\sigma^3 \leq 0.8$ 时, 能与模拟计算值相符. Sengers 等人^[19], 对刚性球估算了三体碰撞的贡献, 计算所得的输运系数按密度展开的第一级数值与恩斯柯克的理论值相当接近, 误差不超过 5%.

由此可见, 为了进一步改善恩斯柯克稠密气体理论, 可以广义的玻氏方程为出发点, 引进非平衡态关联函数 $Y\left(\frac{\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2}{2}\right)$, 得到确定单粒子分布函数的推广的恩斯柯克方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{r}_1} = & \int d\mathbf{p}_2 \int b db \int d\varepsilon \frac{|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2|}{m} \left[Y' \left(\frac{\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2}{2} \right) f_1(\mathbf{R}_1, \mathbf{p}_1', t) \right. \\ & \left. \cdot f_1(\mathbf{R}_2, \mathbf{p}_2', t) - Y \left(\frac{\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2}{2} \right) f_1(\mathbf{R}_1, \mathbf{p}_1, t) f_1(\mathbf{R}_2, \mathbf{p}_2, t) \right], \end{aligned} \quad (14)$$

其中 Y 和 Y' 分别为碰撞前后的关联函数, 它们的数值取在 $\frac{1}{2}(\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2)$ 处, 是为了保持 Y 函数对粒子“1”和“2”的交换对称性. 由 (2) 式可知, 一般情况下的关联函数 Y 不仅

估计了两体的位置关联, 而且也估计到两体以上的位置关联对分布函数 f_1 的影响. 推广的恩氏方程 (14) 较之恩氏方程 (1) 的优点还在于, 用它可以讨论以任意位势相互作用的稠密气体里的输运现象.

以通用的查普曼-恩斯柯克方法求解推广的恩氏方程 (14). 首先把 (14) 式的碰撞积分项在 $\mathbf{r}$ 附近作级数展开, 保留到对 $\mathbf{r}$ 微商的二次项. 则不难证明, 对于碰撞不变量 $\Psi = m, \mathbf{p}$ 和 $p^2/2m$, 可以得到通常的流体动力学方程组, 并给出压强张量 $\mathbf{P}$ 和热流矢量 $\mathbf{q}$ 的计算公式为

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}_k + \mathbf{P}_\phi,$$

其中

$$\mathbf{P}_k = \int m \left(\frac{\mathbf{p}}{m} - \mathbf{v}_0 \right) \left(\frac{\mathbf{p}}{m} - \mathbf{v}_0 \right) f d\mathbf{p}, \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_\phi = & -\frac{1}{2} Y(\mathbf{r}) \iiint \frac{\mathbf{r}_{21} \mathbf{r}_{21}}{r_{21}} \cdot \frac{d\varphi}{dr_{21}} f f_1 d\mathbf{p} d\mathbf{p}_1 d\mathbf{r}_{21} - \frac{1}{4} Y(\mathbf{r}) \iiint \frac{\mathbf{r}_{21} \mathbf{r}_{21}}{r_{21}} \frac{d\varphi}{dr_{21}} \\ & \cdot \left[\Delta \mathbf{r}_{21} \cdot \left(f \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{r}} - f_1 \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \right) \right] d\mathbf{p} d\mathbf{p}_1 d\mathbf{r}_{21}; \end{aligned} \quad (16)$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_k + \mathbf{q}_{\phi_1} + \mathbf{q}_{\phi_2},$$

其中

$$\mathbf{q}_k = \frac{1}{2} m \int \left(\frac{\mathbf{p}}{m} - \mathbf{v}_0 \right)^2 \left(\frac{\mathbf{p}}{m} - \mathbf{v}_0 \right) f d\mathbf{p}, \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_{\phi_1} = & -\frac{1}{4} Y(\mathbf{r}) \iiint \frac{\mathbf{r}_{21} \mathbf{r}_{21}}{r_{21}} \frac{d\varphi}{dr_{21}} \cdot \left[\left(\frac{\mathbf{p}}{m} - \mathbf{v}_0 \right) + \left(\frac{\mathbf{p}_1}{m} - \mathbf{v}_0 \right) \right] f f_1 d\mathbf{p} d\mathbf{p}_1 d\mathbf{r}_{21} \\ & - \frac{1}{8} Y(\mathbf{r}) \iiint \frac{\mathbf{r}_{21} \mathbf{r}_{21}}{r_{21}} \frac{d\varphi}{dr_{21}} \times \left[\left(\frac{\mathbf{p}}{m} - \mathbf{v}_0 \right) + \left(\frac{\mathbf{p}_1}{m} - \mathbf{v}_0 \right) \right] \\ & \cdot \left[\Delta \mathbf{r}_{21} \cdot \left(f \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{r}} - f_1 \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \right) \right] d\mathbf{p} d\mathbf{p}_1 d\mathbf{r}_{21}, \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_{\phi_2} = & \frac{1}{4} Y(\mathbf{r}) \iiint \varphi \left[\left(\frac{\mathbf{p}}{m} - \mathbf{v}_0 \right) + \left(\frac{\mathbf{p}_1}{m} - \mathbf{v}_0 \right) \right] f f_1 d\mathbf{p} d\mathbf{p}_1 d\mathbf{r}_{21} \\ & + \frac{1}{8} \iiint \varphi \left[\left(\frac{\mathbf{p}}{m} - \mathbf{v}_0 \right) + \left(\frac{\mathbf{p}_1}{m} - \mathbf{v}_0 \right) \right] \times \left(\mathbf{r}_{21} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} f f_1 Y \right) d\mathbf{p} d\mathbf{p}_1 d\mathbf{r}_{21} \\ & + \frac{1}{8} Y(\mathbf{r}) \iiint \varphi \left[\left(\frac{\mathbf{p}}{m} - \mathbf{v}_0 \right) + \left(\frac{\mathbf{p}_1}{m} - \mathbf{v}_0 \right) \right] \\ & \cdot \left[\Delta \mathbf{r}_{21} \cdot \left(f \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{r}} - f_1 \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} \right) \right] d\mathbf{p} d\mathbf{p}_1 d\mathbf{r}_{21}. \end{aligned} \quad (19)$$

其次, 设单粒子分布函数

$$f = f^{(0)}(1 + \Phi), \quad (20)$$

则零级近似解, 即平衡态的解为

$$f^{(0)} = n \varphi_0, \quad \varphi_0 = (2\pi m k T)^{-3/2} \exp\left(-\frac{m}{2kT} V^2\right), \quad (21)$$

其中 $n, \mathbf{v}_0, T$ 分别为局域的粒子数密度、宏观的运动速度和热力学温度; $\mathbf{V} = \left(\frac{\mathbf{p}}{m}\right) - \mathbf{v}_0$

为分子相对 $\mathbf{v}_0$ 的速度. 将 (21) 式代入 (15) 和 (16) 式以及 (17)–(19) 式, 可得

$$\mathbf{P}^{(0)} = p\mathbf{U} = nkT \left[1 - \frac{n}{2} \beta_1(T) Y(\mathbf{r}) \right] \mathbf{U}, \quad (22)$$

$$\mathbf{q}^{(0)} = 0, \quad (23)$$

其中 p 就是气体的静压强, 而 $\beta_1(T) = \int_0^\infty (e^{-\varphi/kT} - 1) d\mathbf{R}$ 是第二维里系数. 因此关联

函数 $Y(\mathbf{r})$ 的物理意义是估计两体和两体以上相互作用对压强的维里展开引进的修正. 由平衡态的统计理论^[12]知道, 它的具体函数形式, 可以在选定粒子之间相互作用势 $\varphi(R)$ 的函数形式之后加以确定.

单粒子分布函数一级近似解的 Φ 函数, 由下列线性非齐次积分方程确定:

$$\begin{aligned} f^{(0)} \left\{ \left(1 - \frac{1}{2} n \beta_1 Y \right) \left(\frac{5}{2} - \frac{mV^2}{2kT} \right) \left(\mathbf{V} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \ln T \right) + n \mathbf{b}(\mathbf{V}) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \ln T \right. \\ \left. - \left(1 - \frac{1}{2} n \beta_1 Y \right) \left(\frac{m}{kT} \mathbf{V} \mathbf{V} - \frac{m}{3kT} V^2 \mathbf{U} \right) : \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v}_0 \right) + n \mathbf{C}(\mathbf{V}) : \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v}_0 \right) \right. \\ \left. + n \frac{2}{3kT} C^{(0)} \left(\frac{m}{2kT} V^2 - \frac{3}{2} \right) \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{v}_0 \right) \right\} = n^2 I(\Phi), \end{aligned} \quad (24)$$

其中

$$I(\Phi) = \frac{1}{n^2} Y \iiint d\mathbf{p}_1 b d\mathbf{b} d\mathbf{e} \frac{|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}|}{m} f^{(0)} f_1^{(0)} (\Phi + \Phi_1 - \Phi' - \Phi'_1), \quad (25)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{b}(\mathbf{V}) = \frac{Y}{(2\pi m kT)^3 \varphi_0} \iint \hat{\Theta}_{12} \frac{\Delta \mathbf{r}_{21}}{2} \left[\frac{\left(\frac{\mathbf{P}}{m} - \mathbf{v}_0 \right)^2 - \left(\frac{\mathbf{P}_1}{m} - \mathbf{v}_0 \right)^2}{2m kT} \right] \\ \cdot \exp \left\{ -\frac{m}{2kT} \left[\left(\frac{\mathbf{P}}{m} - \mathbf{v}_0 \right)^2 + \left(\frac{\mathbf{P}_1}{m} - \mathbf{v}_0 \right)^2 \right] \right\} d\mathbf{p}_1 d\mathbf{r}_1, \end{aligned} \quad (26)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{C}(\mathbf{V}) = \frac{Y}{(2\pi m kT)^3 \varphi_0} \iint \hat{\Theta}_{12} \frac{\Delta \mathbf{r}_{12}}{2} \left[\frac{\left(\frac{\mathbf{P}}{m} - \mathbf{v}_0 \right) - \left(\frac{\mathbf{P}_1}{m} - \mathbf{v}_0 \right)}{kT} \right] \\ \cdot \exp \left\{ -\frac{m}{2kT} \left[\left(\frac{\mathbf{P}}{m} - \mathbf{v}_0 \right)^2 + \left(\frac{\mathbf{P}_1}{m} - \mathbf{v}_0 \right)^2 \right] \right\} d\mathbf{p}_1 d\mathbf{r}_1, \end{aligned} \quad (27)$$

$$C^{(0)} = -\frac{1}{12} Y \iiint \left[(\mathbf{V} - \mathbf{V}_1) \cdot \frac{\mathbf{r}_{21}}{r_{21}} \right] \frac{d\varphi}{dr_{21}} \varphi_0(\mathbf{P}) \varphi_0(\mathbf{P}_1) \left(\frac{\mathbf{P} - \mathbf{P}_1}{m kT} \cdot \Delta \mathbf{r}_{21} \right) d\mathbf{p} d\mathbf{p}_1 d\mathbf{r}_{21}, \quad (28)$$

而

$$\mathbf{P} = \hat{S}_{\rightarrow}^{(2)}(x, x_1) \hat{S}_i^{(1)}(x) \hat{S}_i^{(1)}(x_1) \mathbf{p}, \quad \mathbf{P}_1 = \hat{S}_{\rightarrow}^{(2)}(x, x_1) \hat{S}_i^{(1)}(x) \hat{S}_i^{(1)}(x_1) \mathbf{p}_1. \quad (29)$$

此外, Φ 必须满足局域平衡条件

$$\int d\mathbf{p} f^{(0)} \Phi = 0, \quad \int d\mathbf{p} \mathbf{p} f^{(0)} \Phi = 0, \quad \int d\mathbf{p} \mathbf{p} \mathbf{p}^2 f^{(0)} \Phi = 0. \quad (30)$$

因此, 为了求解线性积分方程 (24), 必须规定粒子之间作用势的具体函数形式, 然后确定 $\Delta \mathbf{r}_{21}$, $\mathbf{P}$ 和 $\mathbf{P}_1$, $\mathbf{b}(\mathbf{V})$, $\mathbf{C}(\mathbf{V})$, $C^{(0)}$ 等. 下面讨论稠密气体中分子按方位势相互作用的特定情况.

二、方位势稠密气体方程 (24) 的解

方位势稠密气体的输运理论曾为 Davis, Rice and Sengers 等^[1-3]讨论过. 除了本文处理问题的方法不同外, 在确定和计算方位势稠密气体的双粒子关联函数方面, 本文提出了一个新的计算方法, 获得与实验值较好的吻合.

以方位势(见图 3)描写气体分子之间的相互作用具有一定的优越性, 首先可以认为分子之间的相互作用是脉冲地瞬时完成的; 其次可初步估算分子相互作用的吸引部分对输运性质的影响, 从而改进恩斯柯克理论只能适用于强排斥的情况; 再次, 由于我们可以把按方位势发生的双粒子碰撞分解为四种不同的“分部碰撞”^[4], 从而使得有可能得到计算稠密气体的输运性质的理论公式. 方位势稠密气体的理论仍未能完全克服估计粒子之间相互作用的速度关联这一困难.

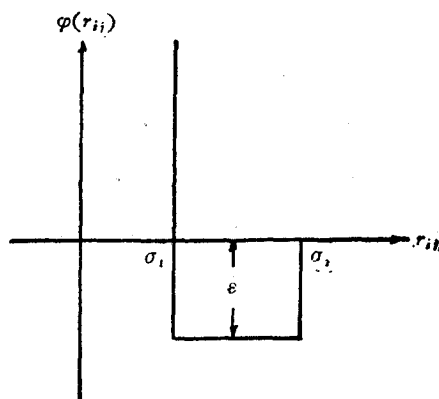


图 3 方位势示意图

$$\varphi(r_{ij}) = \begin{cases} +\infty & 0 \leq r_{ij} \leq \sigma_1, \\ -\varepsilon & \sigma_1 < r_{ij} \leq \sigma_2, \\ 0 & \sigma_2 < r_{ij} < \infty \end{cases}$$

1. 方位势碰撞动力学

为了便于讨论, 我们把按方位势发生的双粒子碰撞过程分解为以下四种碰撞动力学过程:

- 1) 在 $r_{ij} = \sigma_1$ 处发生的刚球碰撞, $(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) > 0$, 这里的 $\mathbf{g} = \mathbf{V}_i - \mathbf{V}_j$, 则必有

$$\mathbf{V}' = \mathbf{V} + \mathbf{k}(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}), \quad \mathbf{V}'_i = \mathbf{V}_i - \mathbf{k}(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) \quad (31)$$

或

$$(\mathbf{V}^2 + \mathbf{V}'^2) - (\mathbf{V}_i^2 + \mathbf{V}_i'^2) = 2\{(\mathbf{V}^2 - \mathbf{V}_i^2) + [\mathbf{k} \cdot (\mathbf{V} + \mathbf{V}_i)](\mathbf{k} \cdot \mathbf{g})\}, \quad (32)$$

$$(\mathbf{V}' + \mathbf{V}) - (\mathbf{V}'_i + \mathbf{V}_i) = 2[(\mathbf{V} - \mathbf{V}_i) + \mathbf{k}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{g})]. \quad (33)$$

- 2) 在 $r_{ij} = \sigma_2$ 处, 粒子 2 进入粒子 1 的方位阱, $(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) > 0$, 则有

$$\mathbf{V}' = \mathbf{V} + \left[\frac{1}{2}(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) - \frac{1}{2}\sqrt{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2 + 4\varepsilon/m} \right] \mathbf{k}, \quad (34)$$

$$\mathbf{V}'_i = \mathbf{V}_i + \left[-\frac{1}{2}(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) + \frac{1}{2}\sqrt{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2 + 4\varepsilon/m} \right] \mathbf{k}. \quad (35)$$

或有

$$(\mathbf{V}^2 + \mathbf{V}'^2) - (\mathbf{V}_i^2 + \mathbf{V}_i'^2) = 2\{(\mathbf{V}^2 - \mathbf{V}_i^2) + \mathbf{k} \cdot (\mathbf{V} + \mathbf{V}_i)(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})\} \\ - [(\mathbf{V} + \mathbf{V}_i) \cdot \mathbf{k}] \cdot [(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) + \sqrt{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2 + 4\varepsilon/m}], \quad (36)$$

$$(\mathbf{V} + \mathbf{V}') - (\mathbf{V}_i + \mathbf{V}'_i) = 2[(\mathbf{V} - \mathbf{V}_i) + \mathbf{k}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{g})] \\ - \{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) + \sqrt{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2 + 4\varepsilon/m}\} \mathbf{k}. \quad (37)$$

又因

$$(\mathbf{g}' \cdot \mathbf{k}) = \sqrt{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2 + 4\varepsilon/m}, \quad (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) = \sqrt{(\mathbf{g}' \cdot \mathbf{k})^2 - 4\varepsilon/m}, \quad (38)$$

故

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}' + \frac{1}{2} [(\mathbf{g}' \cdot \mathbf{k}') + \sqrt{(\mathbf{g}' \cdot \mathbf{k}')^2 - 4\epsilon/m}] \mathbf{k}', \quad (39)$$

$$\mathbf{V}_1 = \mathbf{V}'_1 - \frac{1}{2} [(\mathbf{g}' \cdot \mathbf{k}') + \sqrt{(\mathbf{g}' \cdot \mathbf{k}')^2 - 4\epsilon/m}] \mathbf{k}', \quad (40)$$

其中 $\mathbf{k}' = -\mathbf{k}$. (39) 和 (40) 式说明, 在 $r_{ij} = \sigma_2$ 处, 粒子 2 离开粒子 1 的方位势阱 (当 $(\mathbf{g}' \cdot \mathbf{k}') < 0$), 是粒子 2 进入粒子 1 的方位势阱的逆碰撞.

由 (39) 和 (40) 式不难得到

$$\mathbf{g}' = \mathbf{V}'_1 - \mathbf{V}' = \mathbf{g} - (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) \mathbf{k} + \sqrt{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2 + 4\epsilon/m} \mathbf{k}, \quad (41)$$

$$\mathbf{g} \cdot \mathbf{g}' = g^2 - 2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2 + (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})[(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) + \sqrt{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2 + 4\epsilon/m}], \quad (42)$$

$$(\mathbf{g} \cdot \mathbf{g}')^2 = [g^2 - 2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2]^2 + (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})[(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) + \sqrt{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2 + 4\epsilon/m}]^2 + 2[g^2 - 2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2](\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})[(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) + \sqrt{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2 + 4\epsilon/m}]. \quad (43)$$

3) 在 $r_{ij} = \sigma_2$ 处, 粒子 2 离开粒子 1 的方位势阱, $(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) < 0$, 同时 $(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) < -(4\epsilon/m)^{1/2}$, 即粒子 2 在 $\mathbf{k}$ 方向上的相对动能大于位阱的势能, 故可穿越势阱而离开粒子 1. 则有

$$\mathbf{V}' = \mathbf{V} + \frac{1}{2} [(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) + \sqrt{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2 - 4\epsilon/m}] \mathbf{k}, \quad (44)$$

$$\mathbf{V}'_1 = \mathbf{V}_1 - \frac{1}{2} [(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) + \sqrt{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2 - 4\epsilon/m}] \mathbf{k}. \quad (45)$$

可以证明, 只要作变换 $(\sqrt{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2 + 4\epsilon/m}) \rightarrow (-\sqrt{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2 - 4\epsilon/m})$, 则 (36) 至 (40) 式就完全适用于这一情况.

(4) 在 $r_{ij} = \sigma_2$ 处, 粒子 2 因其 $(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) > -(4\epsilon/m)^{1/2}$ 而离不开粒子 1 的方位势阱, 形成某种束缚的状态. 这时 (31) 至 (33) 式仍然成立, 只是 $(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) < 0$.

2. 双粒子关联函数 Y_1 和 Y_2

把以方位势发生的碰撞过程分解为四个分部碰撞后, 在计算 (24) 式至 (28) 式时, 也应按四种碰撞动力学进行. 因此取代一个双粒子关联函数 Y , 必须引进两个关联函数 Y_1 和 Y_2 , 分别表示 $r_{ij} = \sigma_1$ 和 σ_2 处, 粒子 i 和 j 发生碰撞时, 与其它粒子在空间上的关联.

当组成体系的粒子以方位势两两作用, 由平衡态的统计理论^[9]可知, 若压强的维里展开为

$$p = nkT \left[1 - \frac{1}{2} n\beta_1(T) - \frac{2}{3} n^2\beta_2(T) - \dots \right], \quad (46)$$

则第二维里系数

$$\beta_1(T) = \int (e^{-\varphi/kT} - 1) d\mathbf{r}_2 = -2b[1 - (\alpha^3 - 1)\Delta], \quad (47)$$

第三维里系数

$$\beta_2(T) = \frac{1}{2!} \int f_{12}f_{23}f_{31} d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 = -\frac{3}{16} b^2 [5 - (\alpha^6 - 18\alpha^4 + 32\alpha^3 - 15)\Delta - 2(\alpha^6 - 18\alpha^4 + 16\alpha^3 + 9\alpha^2 - 8)\Delta^2 - 6(\alpha^6 - 3\alpha^4 + 3\alpha^2 - 1)\Delta^3]$$

$$(\alpha \leq 2), \quad (48)$$

这里

$$\alpha = \sigma_2/\sigma_1, \quad \Delta = \exp\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right) - 1. \quad (49)$$

另一方面由零级近似时的压强张量 $\mathbf{P}^{(0)} = \mathbf{P}_k^{(0)} + \mathbf{P}_\phi^{(0)}$, 考虑到刚球碰撞时, $\mathbf{r}_{21} = -\sigma\mathbf{k}$, $d\mathbf{r}_{21} = \sigma^2(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})d\mathbf{k}dt$, $\frac{d\varphi}{d\mathbf{r}_{21}}dt = m(\mathbf{V}' - \mathbf{V})$ 和把按方位势相互碰撞分解为四个分部碰撞, 可写为

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_k^{(0)} &= \int m\mathbf{V}\mathbf{V}f^{(0)}d\mathbf{p} = nkT\mathbf{U}, \\ \mathbf{P}_\phi^{(0)} &= \frac{1}{2}\sigma_1^3Y_1e^{\varepsilon/kT}\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^3n^2\iiint_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) > 0} m(\mathbf{V}' - \mathbf{V})(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})\mathbf{k}d\mathbf{k}e^{-\frac{mV^2+mV_1^2}{2kT}}d\mathbf{V}d\mathbf{V}_1 \\ &\quad + \frac{1}{2}\sigma_2^3Y_2n^2\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^3\iiint_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) > 0} + \frac{1}{2}\sigma_2^3Y_2n^2\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^3e^{\varepsilon/kT}\iiint_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) < -\omega} \\ &\quad + \frac{1}{2}\sigma_2^3Y_2n^2\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^3e^{\varepsilon/kT}\iiint_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) > -\omega}, \end{aligned} \quad (51)$$

其中 $\omega^2 = (4\varepsilon/m)$. 此外, (51)式等号右边的后三项的被积函数的形式与第一项完全一样, 故只写出积分号代表, 下面遇此情况, 作类似处理.

现若把 (31), (34) 和 (44) 式代入 (51) 式, 并应用附录一的积分 (A.1), (A.5) 和 (A.6) 式, 可以求得

$$\mathbf{P}^{(0)} = nkT\{1 + nb[Y_1(1 + \Delta) + Y_2\Delta\alpha^3]\}\mathbf{U} = p\mathbf{U}. \quad (52)$$

比较 (52) 式和 (46) 式, 可以求得方位势稠密气体的双粒子空间关联函数 Y_1 和 Y_2 分别为

$$Y_1 = 1 + \frac{1}{8}bn\left[\frac{5 + 15\Delta + 16\Delta^2 + 6\Delta^3}{1 + \Delta}\right], \quad (53)$$

$$\begin{aligned} Y_2 &= 1 + \frac{1}{8}bn\left[(\alpha^3 - 18\alpha + 32) + \frac{2\Delta}{\alpha}(\alpha^4 - 18\alpha^2 + 16\alpha + 9) \right. \\ &\quad \left. + \frac{6\Delta^2}{\alpha}(\alpha^4 - 3\alpha^2 + 3)\right]. \end{aligned} \quad (54)$$

3. 单粒子分布函数的一级近似解

单粒子分布函数的一级近似解满足方程 (24) 和附加条件 (30) 式. 对于四种分部碰撞 (24) 式可写为

$$\begin{aligned} n^2I(\Phi) &= Y_1e^{\varepsilon/kT}\sigma_1^2\iiint_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) > 0} d\mathbf{V}_1d\mathbf{k}(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})f_1^{(0)}(\mathbf{V}_1)f_1^{(0)}(\mathbf{V})(\Phi + \Phi_1 - \Phi' - \Phi'_1) \\ &\quad + Y_2\sigma_2^2\iiint_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) > 0} + Y_2\sigma_2^2e^{\varepsilon/kT}\iiint_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) < -\omega} + Y_2\sigma_2^2e^{\varepsilon/kT}\iiint_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) > -\omega}. \end{aligned} \quad (55)$$

类似地, 可把 $\mathbf{b}(\mathbf{V})$ 和 $\mathbf{C}(\mathbf{V})$ 改写为

$$\mathbf{b}(\mathbf{V}) = \left(\frac{m}{4kT}\right)\left\{Y_1\sigma_1^3e^{\varepsilon/kT}\iiint_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) > 0} d\mathbf{V}_1d\mathbf{k}(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})\mathbf{k}f_1^{(0)}(\mathbf{V}_1)[(V^2 + V'^2)]\right\}$$

$$-(V_1^2 + V_1'^2)] + Y_2 \sigma_2^3 \iint_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) > 0} + Y_2 \sigma_2^3 e^{\varepsilon/kT} \iint_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) > -\omega} + Y_2 \sigma_2^3 e^{\varepsilon/kT} \iint_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) < -\omega} \}, \quad (56)$$

$$\mathbf{C}(\mathbf{V}) = \left(\frac{m}{2kT} \right) \left\{ Y_1 \sigma_1^3 e^{\varepsilon/kT} \iint_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) > 0} d\mathbf{V}_1 d\mathbf{k} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) \mathbf{k} f_1^{(0)}(V_1) (\mathbf{V} + \mathbf{V}' - \mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_1') \right. \\ \left. + Y_2 \sigma_2^3 \iint_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) > 0} + Y_2 \sigma_2^3 e^{\varepsilon/kT} \iint_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) > -\omega} + Y_2 \sigma_2^3 e^{\varepsilon/kT} \iint_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) < -\omega} \right\}, \quad (57)$$

把(32), (36)和(33), (37)式分别代入(56)和(57)式,利用附录一完成积分,即可得

$$\mathbf{b}(\mathbf{V}) = \frac{4}{15} \pi \left(\frac{mV^2}{2kT} - \frac{5}{2} \right) (Y_1 \sigma_1^3 e^{\varepsilon/kT} - Y_2 \sigma_2^3 e^{\varepsilon/kT} + Y_2 \sigma_2^3) \mathbf{V} - Y_2 (\mathbf{I}_1 + \mathbf{I}_2), \quad (58)$$

$$\mathbf{C}(\mathbf{V}) = \frac{2}{5} \pi \left(\frac{m}{kT} \mathbf{V} \mathbf{V} - \frac{m}{3kT} V^2 \mathbf{U} \right) (Y_1 \sigma_1^3 e^{\varepsilon/kT} - Y_2 \sigma_2^3 e^{\varepsilon/kT} + Y_2 \sigma_2^3) \\ - Y_2 (\mathbf{I}_3 + \mathbf{I}_4), \quad (59)$$

其中

$$\mathbf{I}_1 + \mathbf{I}_2 = \left(\frac{m}{2kT} \right) \left(\frac{\pi n^2 \sigma_2^3}{30} \right) \left\{ e^{\varepsilon/kT} \int_{g > \omega} d\mathbf{V}_1 f_1^{(0)}(V) f_1^{(0)}(V_1) (\mathbf{V} + \mathbf{V}_1) \right. \\ \cdot [H_1(g) \overset{\circ}{\mathbf{g}} \mathbf{g} + H_2(g) \mathbf{U}] - \int d\mathbf{V}_1 f_1^{(0)}(V) f_1^{(0)}(V_1) (\mathbf{V} + \mathbf{V}_1) \\ \cdot [H_3(g) \overset{\circ}{\mathbf{g}} \mathbf{g} + H_4(g) \mathbf{U}] \left. \right\}, \quad (60)$$

$$\mathbf{I}_3 + \mathbf{I}_4 = \left(\frac{m}{kT} \right) \left(\frac{\pi n^2 \sigma_2^3}{30} \right) \left\{ e^{\varepsilon/kT} \int_{g > \omega} d\mathbf{V}_1 f_1^{(0)}(V) f_1^{(0)}(V_1) [H_1(g) \overset{\circ}{\mathbf{g}} \mathbf{g} + H_2(g) \mathbf{U}] \right. \\ \left. - \int d\mathbf{V}_1 f_1^{(0)}(V) f_1^{(0)}(V_1) [H_3(g) \overset{\circ}{\mathbf{g}} \mathbf{g} + H_4(g) \mathbf{U}] \right\}, \quad (61)$$

而

$$H_1(g) = 4 - 9 \left(\frac{\omega}{g} \right)^5 + 5 \left(\frac{\omega}{g} \right)^3 + \left(1 - \frac{\omega^2}{g^2} \right)^{3/2} \left(4 + 6 \frac{\omega^2}{g^2} \right), \quad (62)$$

$$H_2(g) = \frac{10}{3} g^2 \left[1 - \left(\frac{\omega}{g} \right)^3 + \left(1 - \frac{\omega^2}{g^2} \right)^{3/2} \right], \quad (63)$$

$$H_3(g) = 4 + \left(1 + \frac{\omega^2}{g^2} \right)^{3/2} \left(4 - 6 \frac{\omega^2}{g^2} \right) + \frac{\omega^3}{g^3} \left(5 + 6 \frac{\omega^2}{g^2} \right), \quad (64)$$

$$H_4(g) = \frac{10}{3} g^2 \left[1 - \frac{\omega^3}{g^3} + \left(1 + \frac{\omega^2}{g^2} \right)^{3/2} \right], \quad (65)$$

$\overset{\circ}{\mathbf{g}} \mathbf{g} = \mathbf{g} \mathbf{g} - \frac{1}{3} g^2 \mathbf{U}$ 为张量 $\mathbf{g} \mathbf{g}$ 的无散张量。

现若把(58)至(59)式代入(24)式,可得确定一级近似的单粒子分布函数的 Φ 的线性积分方程为

$$-f^{(0)} \left\{ \left(1 - \frac{1}{5} n \beta_1 Y \right) \left(\frac{m}{kT} \mathbf{V} \mathbf{V} - \frac{mV^2}{3kT} \mathbf{U} \right) : \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v}_0 \right) + \left(1 - \frac{3}{10} n \beta_1 Y \right) \right. \\ \left. \cdot \left(\frac{mV^2}{2kT} - \frac{5}{2} \right) \left(\mathbf{V} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \ln T \right) + \frac{2}{3} \frac{C^{(0)}}{kT} \left(\frac{mV^2}{2kT} - \frac{3}{2} \right) \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{v}_0 \right) \right\}$$

$$\begin{aligned}
& + Y_2 \left(\frac{m}{2kT} \right) \left(\frac{\pi n^2 \sigma_2^3}{30} \right) \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \ln T \right) \left\{ e^{\varepsilon/kT} \int_{g>\omega} d\mathbf{V}_1 f^{(0)} f_1^{(0)} (\mathbf{V} + \mathbf{V}_1) \right. \\
& \cdot [H_1(g) \overset{\circ}{\mathbf{g}}\mathbf{g} + H_2(g) \mathbf{U}] - \int d\mathbf{V}_1 f^{(0)} f_1^{(0)} (\mathbf{V} + \mathbf{V}_1) [H_3(g) \overset{\circ}{\mathbf{g}}\mathbf{g} + H_4(g) \mathbf{U}] \Big\} \\
& + Y_2 \left(\frac{m}{kT} \right) \left(\frac{\pi n^2 \sigma_2^3}{30} \right) \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v}_0 \right) : \left\{ e^{\varepsilon/kT} \int_{g>\omega} d\mathbf{V}_1 f^{(0)} f_1^{(0)} [H_1(g) \overset{\circ}{\mathbf{g}}\mathbf{g} + H_2(g) \mathbf{U}] \right. \\
& \left. - \int d\mathbf{V}_1 f^{(0)} f_1^{(0)} [H_3(g) \overset{\circ}{\mathbf{g}}\mathbf{g} + H_4(g) \mathbf{U}] \right\} = n^2 I(\Phi), \quad (66)
\end{aligned}$$

其中 $I(\Phi)$ 由 (25) 式给出, 而

$$Y = Y_1(\Delta - 1) - Y_2 \alpha^3 \Delta. \quad (67)$$

设

$$\Phi(\mathbf{V}) = \mathbf{A}(\mathbf{V}) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \ln T + \mathbf{B}(\mathbf{V}) : \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v}_0 + C(\mathbf{V}) \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{v}_0 \right), \quad (68)$$

则可由 (66) 式得到确定 $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$, C 的线性积分方程为

$$\begin{aligned}
& -f^{(0)} \left(1 - \frac{3}{10} n \beta_1 Y \right) \left(\frac{m V^2}{2kT} - \frac{5}{2} \right) \mathbf{V} + Y_2 \left(\frac{m}{2kT} \right) \left(\frac{n^2 \sigma_2^3 \pi}{30} \right) \\
& \cdot \left\{ e^{\varepsilon/kT} \int_{g>\omega} d\mathbf{V}_1 f^{(0)} f_1^{(0)} (\mathbf{V} + \mathbf{V}_1) [H_1(g) \overset{\circ}{\mathbf{g}}\mathbf{g} + H_2(g) \mathbf{U}] \right. \\
& \left. - \int d\mathbf{V}_1 f^{(0)} f_1^{(0)} (\mathbf{V} + \mathbf{V}_1) [H_3(g) \overset{\circ}{\mathbf{g}}\mathbf{g} + H_4(g) \mathbf{U}] \right\} = n^2 I(\mathbf{A}), \quad (69)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -f^{(0)} \left(1 - \frac{1}{5} n \beta_1 Y \right) \left(\frac{m}{kT} \mathbf{V} \mathbf{V} - \frac{m V^2}{3kT} \mathbf{U} \right) + Y_2 \left(\frac{m}{kT} \right) \left(\frac{n^2 \sigma_2^3 \pi}{30} \right) \\
& \cdot \left\{ e^{\varepsilon/kT} \int_{g>\omega} d\mathbf{V}_1 f^{(0)} f_1^{(0)} H_1(g) \overset{\circ}{\mathbf{g}}\mathbf{g} - \int d\mathbf{V}_1 f^{(0)} f_1^{(0)} H_3(g) \overset{\circ}{\mathbf{g}}\mathbf{g} \right\} = n^2 I(\mathbf{B}), \quad (70)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -f^{(0)} \frac{2}{3} \frac{C^{(0)}}{kT} \left(\frac{m}{2kT} - \frac{3}{2} \right) + Y_2 \left(\frac{m}{kT} \right) \left(\frac{n^2 \sigma_2^3 \pi}{30} \right) \left\{ e^{\varepsilon/kT} \int_{g>\omega} d\mathbf{V}_1 f^{(0)} f_1^{(0)} H_2(g) \right. \\
& \left. - \int d\mathbf{V}_1 f^{(0)} f_1^{(0)} H_4(g) \right\} = n^2 I(C). \quad (71)
\end{aligned}$$

先讨论 (71) 式. 若对它两边都乘以 $d\mathbf{V}$, 并积分. 再作变量变换 $(\mathbf{V}, \mathbf{V}_1) \rightarrow (g, \mathbf{G}_0)$, 即

$$\mathbf{g} = \mathbf{V}_1 - \mathbf{V}, \quad \mathbf{G}_0 = \frac{1}{2} (\mathbf{V} + \mathbf{V}_1), \quad (72)$$

故

$$\frac{1}{2} m \mathbf{V}^2 + \frac{1}{2} m \mathbf{V}_1^2 = m \mathbf{G}_0^2 + \frac{1}{4} m \mathbf{g}^2, \quad d\mathbf{G}_0 d\mathbf{g} = d\mathbf{V} d\mathbf{V}_1. \quad (73)$$

则可以证明, 等式左边为零, 即 $n^2 \int I(C) d\mathbf{V} = 0$, 这只有当 $C(\mathbf{V})$ 是碰撞总和不变量时才成立, 即 $C(\mathbf{V}) = C_1(\mathbf{r}) + \mathbf{C}_2(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{V} + C_3(\mathbf{r}) V^2$. 由条件 (30) 式, 必有 $C_1 = C_3 = 0$, $\mathbf{C}_2$ 为正比 $\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \ln T$ 的量, 故在讨论一级近似时, 可将 (68) 式右边的第三项忽略, 得

$$\Phi(\mathbf{V}) = \mathbf{A}(\mathbf{V}) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \ln T + \mathbf{B}(\mathbf{V}) : \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v}_0. \quad (74)$$

如通常在查普曼-恩斯柯克方法做的那样, 设

$$\mathbf{A}(\mathbf{V}) = A(W)\mathbf{W}, \quad \mathbf{B}(\mathbf{V}) = B(W)\overset{\circ}{\mathbf{W}}\mathbf{W}, \quad (75)$$

式中 $\mathbf{W} = \left(\frac{m}{2kT}\right)^{\frac{1}{2}} \mathbf{V}$. 系数 $A(W)$ 和 $B(W)$ 按 Sonine 多项式展开:

$$A(W) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m^{(n)} S_{3/2}^{(m)}(W^2), \quad B(W) = \sum_{m=0}^{n-1} b_m^{(n)} S_{5/2}^{(m)}(W^2). \quad (76)$$

定义脚标 ν 参量为 W^2 的 m 级 Sonine 多项式为

$$S_{\nu}^{(m)}(W^2) = \sum_{l=0}^m \frac{\Gamma(\nu + m - 1)}{(m-l)! l! \Gamma(\nu + l)} (-W^2)^l, \quad (77)$$

它满足归一条件

$$\int_0^{\infty} e^{-W^2} S_{\nu}^{(p)}(W^2) S_{\nu}^{(q)}(W^2) W^{2\nu} dW^2 = \begin{cases} 0, & p \neq q, \\ \frac{1}{n!} \Gamma(\nu + n + 1), & p = q = n. \end{cases} \quad (78)$$

由于 $A(\mathbf{W})$ 必须满足 (30) 式的附加条件, 即 $\int d\mathbf{p} \mathbf{f}^{(0)} A(\mathbf{W}) W^2 = 0$, 故 $a_0^{(n)} = 0$. 若只取 (75) 式级数分解的第一项, 即 $n = 1$, 可得

$$A(W) = a_1^{(1)} S_{3/2}^{(1)}(W^2) = a_1^{(1)} \left(\frac{5}{2} - W^2\right), \quad B(W) = b_0^{(1)} S_{5/2}^{(0)}(W^2) = b_0^{(1)}. \quad (79)$$

现在把 (79) 式代入 (75) 式, 然后对 (69) 式两边都乘以 $\mathbf{W} S_{3/2}^{(1)}(W^2)$, 再对 $d\mathbf{V}$ 积分, 则得

$$a_1^{(1)} = \frac{K_1 + K_2 + K_3 + K_4 + K_5}{n^2 \int d\mathbf{V} I \left[\left(\frac{5}{2} - W^2\right) \mathbf{W} \right] \mathbf{W} S_{3/2}^{(1)}(W^2)}. \quad (80)$$

上式分子上的 $K_i (i = 1, \dots, 5)$ 分别代表 (69) 式左边五项在乘以 $\mathbf{W} S_{3/2}^{(1)}(W^2)$ 后, 再对 $d\mathbf{V}$ 的积分. K_1 很易求得, 为了求得 $K_2 - K_5$ 的积分值, 先作 (72) 式的变量变换, 对 $d\mathbf{G}_0$ 完成积分; 再引进无量纲相对速度 $\mathscr{G} = \left(\frac{m}{4kT}\right)^{\frac{1}{2}} \mathbf{g}$ 和变换 $u^2 = \mathscr{G}^2 - s^2$, 即可得

$$K_1 = \frac{15}{4} n \left(1 - \frac{3}{10} \beta_1 Y n\right) \left(\frac{2kT}{m}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad (81)$$

$$K_2 + K_4 = \frac{1}{3} Y_2 \sigma_2^3 n^2 s^2 \left(\frac{2\pi kT}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2} + 2e^{s^2} \int_s^{\infty} e^{-u^2} u^2 du\right), \quad (82)$$

$$K_3 + K_5 = \frac{5}{6} Y_2 \sigma_2^3 n^2 s^2 \left(\frac{2\pi kT}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2} + 2e^{s^2} \int_s^{\infty} e^{-u^2} u^2 du\right). \quad (83)$$

上式中的 $s^2 = \frac{\varepsilon}{kT} = \frac{m\omega^2}{4kT}$.

可以证明, (80) 式的分母经积分后(见附录二)为

$$\begin{aligned} & 8\sqrt{2\pi n^2} \left(\frac{2kT}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \left\{ \frac{1}{2} (Y_1 \sigma_1^2 e^{s^2} + Y_2 \sigma_2^2 + Y_2 \sigma_2^2 e^{s^2}) \right. \\ & \left. - Y_2 \sigma_2^2 \left[\frac{1}{2} + \frac{s^2}{4} + \frac{s^2}{4} e^{s^2/2} K_1 \left(\frac{s^2}{2}\right) \right] + \frac{\sigma_2^4 s^4}{8} \right\}, \end{aligned} \quad (84)$$

其中函数

$$K_1(s^2/2) = \frac{4}{s^2} e^{-s^2/2} \int_0^\infty e^{-u^2} u^2 (u^2 + s^2)^{\frac{1}{2}} du, \quad (85)$$

故得

$$a_1^{(1)} = \frac{15}{16\sqrt{2}n\pi^{1/2}\sigma_1^2} \left\{ \frac{1 + \frac{3}{5}bn \left[Y_1 e^{s^2} + \frac{7}{9} Y_2 \alpha^3 \Psi(s^2) - \frac{2}{9} \alpha^3 Y_2 (e^{s^2} - 1) \right]}{Y_1 e^{s^2} + Y_2 \alpha^2 \Xi(s^2) + Y_2 \frac{\alpha^2}{4} s^4} \right\}, \quad (86)$$

其中

$$\Psi(s^2) = 1 - e^{s^2} + \frac{s^2}{2} \left[1 + \frac{4}{\sqrt{\pi}} e^{s^2} \int_s^\infty e^{-u^2} u^2 du \right], \quad (87)$$

$$\Xi(s^2) = e^{s^2} - \frac{1}{2} s^2 - 2 \int_0^\infty e^{-u^2} u^2 (u^2 + s^2)^{\frac{1}{2}} du. \quad (88)$$

作类似的运算, 可求得

$$b_0^{(1)} = -\frac{5}{8} \left(\frac{m}{\pi k T} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{n\sigma_1^2} \left\{ \frac{1 + \frac{2}{5}nb[Y_1 e^{s^2} + \alpha^3 Y_2 \Psi(s^2)]}{Y_1 e^{s^2} + Y_2 \alpha^2 [\Xi(s^2) + \frac{1}{4} s^4]} \right\}. \quad (89)$$

知道了 $a_1^{(1)}$, $b_0^{(1)}$, 也就知道了取级数分解第一项时的 Φ 函数的一级近似解。

三、方位势稠密气体的输运系数

求得方位势稠密气体单粒子分布函数的一级近似解之后, 即可按 (15)–(19) 式求得一级近似时的压强张量 $\mathbf{P}^{(1)}$ 和热流向量 $\mathbf{q}^{(1)}$ 的公式, 从而确定粘滞系数 η 、体积粘滞系数 κ 和热导率 λ . 推导过程见附录三, 这里直接写出总的压强张量 $\mathbf{P} = \mathbf{P}^{(0)} + \mathbf{P}^{(1)}$ 为

$$\begin{aligned} \mathbf{P} = n k T \left(1 - \frac{1}{2} \beta_1 n Y \right) \mathbf{U} + \left\{ n k T b_0^{(1)} - \frac{1}{5} n^2 k T \beta_1 Y b_0^{(1)} + \frac{4}{15} \pi n^2 k T \sigma_2^3 Y_2 b_0^{(1)} \right. \\ \left. \cdot [\Psi(s^2) + e^{s^2} - 1] - \frac{8}{15} n^2 (\pi m k T)^{\frac{1}{2}} \times \left[Y_1 \sigma_1^4 e^{s^2} + \sigma_2^4 Y_2 \left(\Xi(s^2) - \frac{1}{4} s^4 \right) \right] \right\} \mathbf{S} \\ - \frac{4}{9} n^2 (\pi m k T)^{\frac{1}{2}} \left[Y_1 \sigma_1^4 e^{s^2} + Y_2 \sigma_2^4 \left(\Xi(s^2) - \frac{s^4}{4} \right) \right] \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{v}_0 \right) \mathbf{U}. \end{aligned} \quad (90)$$

把上式与通常的牛顿定律: $\mathbf{P} = p\mathbf{U} - 2\eta\mathbf{S} - \kappa \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{v}_0 \right) \mathbf{U}$ 相比较, 把 $b_0^{(1)}$ 换成 (87)

式的结果, 经过一些运算可得

$$\begin{aligned} \eta = \eta_0 \left(\frac{\left\{ 1 + \frac{2}{5}nb[Y_1 e^{s^2} + \alpha^3 Y_2 \Psi(s^2)] \right\}^2}{Y_1 e^{s^2} + Y_2 \alpha^2 \left[\Xi(s^2) + \frac{1}{4} s^4 \right]} \right. \\ \left. + \frac{48}{25\pi} b^2 n^2 \left[Y_1 e^{s^2} + \alpha^4 Y_2 \Xi(s^2) - Y_2 \frac{\alpha^4 s^4}{4} \right] \right), \end{aligned} \quad (91)$$

$$\kappa = \frac{16}{5\pi} \eta_0 n^2 b^2 \left[Y_1 e^{s^2} + Y_2 \alpha^4 \left(\Xi(s^2) - \frac{1}{4} s^4 \right) \right], \quad (92)$$

其中

$$\eta_0 = \frac{5}{16} \frac{(\pi m k T)^{\frac{1}{2}}}{\pi \sigma_1^2}, \quad b = \frac{2}{3} \pi \sigma_1^3, \quad s^2 = \frac{\varepsilon}{kT}, \quad \alpha = \sigma_2/\sigma_1. \quad (93)$$

而函数 $\Xi(s^2)$, $\Psi(s^2)$, Y_1 和 Y_2 分别由 (88), (87), (53) 和 (54) 式给出. 因此只要给出某种特定气体的方位势参数 σ_1 , α , ε 就可以应用 (91) 和 (92) 式计算 η 和 κ 作为无量纲

的温度 $s^2 = \frac{\varepsilon}{kT}$ 和无量纲的密度 $nb = \frac{2}{3} \pi \rho m \sigma_1^3$ 的函数的数值. 类似地可求得

$$\begin{aligned} q = & - \left(\frac{5}{4} n k \left(\frac{2kT}{m} \right)^{\frac{1}{2}} a_1^{(1)} - n^2 a_1^{(1)} k \left(\frac{2\pi kT}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \left\{ \frac{3}{8} \frac{\beta_1}{\sqrt{\pi}} Y \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{7}{18} \sqrt{\pi} \sigma_2^3 Y_2 [\Psi(s^2) + e^{s^2} - 1] \right\} + \frac{2}{3} n^2 k \left(\frac{\pi kT}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \right. \\ & \left. \cdot \left[Y_1 \sigma_1^4 e^{s^2} + Y_2 \sigma_2^4 \Xi(s^2) - \frac{1}{4} \sigma_2^4 s^4 \right] \right) \cdot \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right). \end{aligned} \quad (94)$$

把 (94) 式与傅里叶定律: $q = -\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right)$ 相比较, 把其中 $a_1^{(1)}$ 换成 (86) 式的结果, 经过适当运算即可得

$$\begin{aligned} \lambda = \lambda_0 \left(\frac{\left\{ 1 + \frac{3}{5} nb \left[Y_1 e^{s^2} + \frac{7}{9} \alpha^3 \Psi(s^2) Y_2 - \frac{7}{9} \alpha^3 Y_2 (e^{s^2} - 1) \right] \right\}^2}{Y_1 e^{s^2} + Y_2 \alpha^2 \Xi(s^2) + Y_2 \frac{1}{4} \alpha^2 s^4} \right. \\ \left. + \frac{32}{25\pi} n^2 b^2 \left[Y_1 e^{s^2} + Y_2 \alpha^4 \left(\Xi(s^2) - \frac{s^4}{4} \right) \right] \right). \end{aligned} \quad (95)$$

可以看出, 当 $s \rightarrow 0$ 时, 由于 $\Xi(s^2) \rightarrow 0$, $\Psi(s^2) \rightarrow 0$, 故由 (91), (92) 和 (95) 式可得恩斯柯克理论的结果.

四、稠密氙气的粘滞系数和热导率

现在以氙气为例, 按 (91) 和 (95) 式计算它的粘滞系数和热导率. 计算结果与恩斯柯克的理论值和形变的恩斯柯克理论 (MET) 进行比较, 并与已有的实验数据^[4-7]作比较.

计算中, 氙气的方位势参数采用文献[9]中在第二维里系数实验数据(注意, 这些数据是对稀薄气体得到的)基础上, 归纳而得的数值, 即

$$\sigma_1 = 3.162 \text{ 埃}, \quad \alpha = 1.85, \quad \varepsilon/k = 69.4 \text{ K}. \quad (96)$$

氙的克分子量为 $\mu_{Ar} = 39.944$ 克/克分子, 分子质量 $m_{Ar} = 6.633 \times 10^{-23}$ 克, $b = \frac{2}{3} \pi \sigma_1^3 = 6.555 \times 10^{-23}$ 立方厘米.

为计算方便起见, 把 (91) 和 (95) 式改写为以下形式:

$$\eta = \eta_B \left[\frac{D}{B} (1 + 0.4bnA)^2 + 0.6112b^2n^2CD \right], \quad (97)$$

$$\Delta\eta = \eta - \eta_B = \eta_B \left\{ \left[\frac{D}{B} (1 + 0.4bnA)^2 + 0.6112b^2n^2CD \right] - 1 \right\}, \quad (98)$$

$$\lambda = \lambda_B \left[\frac{D}{B} (1 + 0.6bnA')^2 + 0.4074n^2b^2CD \right], \quad (99)$$

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda_B = \lambda_B \left\{ \left[\frac{D}{B} (1 + 0.6bnA')^2 + 0.4074n^2b^2CD \right] - 1 \right\}, \quad (100)$$

其中

$$A = Y_1e^{s^2} + Y_2\alpha^3\Psi(s^2), \quad B = Y_1e^{s^2} + Y_2\alpha^2 \left[\Xi(s^2) + \frac{1}{4}s^4 \right], \quad (101)$$

$$C = Y_1e^{s^2} + Y_2\alpha^4 \left[\Xi(s^2) - \frac{1}{4}s^4 \right], \quad D = e^{s^2} + \alpha^2 \left[\Xi(s^2) + \frac{1}{4}s^4 \right],$$

$$A' = Y_1e^{s^2} + \frac{7}{9}\alpha^3Y_2 \left[\Psi(s^2) - \frac{2}{9}(e^{s^2} - 1) \right], \quad (102)$$

$$\eta_B = \eta_0 D^{-1}, \quad \lambda_B = \lambda_0 D^{-1}. \quad (103)$$

η_B 和 λ_B 分别表示低密度极限时的气体粘滞率和热导率, 而 (101) 和 (102) 式中的 Y_1 和 Y_2 分别由 (53) 和 (54) 式给出.

应用上列公式, 计算了温度为 348K 和 173K 的稠密氙气的粘滞系数 η 和温度为 348K 和 183K 的氙气的热导率. 计算中所需的函数 $\Xi(s^2)$ 和 $\Psi(s^2)$ 的数值取自文献 [2]. η_B 和 λ_B 的数值, 可以由 (103) 式计算而得, 也可以直接取实验数据如: $\lambda_B(T = 183K) =$

表 1 本文计算结果

ρ 克/立方厘米		0.101	0.202	0.405	0.607	0.810	1.010
bn		0.10	0.20	0.40	0.60	0.80	1.00
$T = 348K$	$\eta \times 10^4$ 克/厘米·秒	2.37	2.55	3.31	4.67	6.79	9.75
	$\Delta\eta \times 10^4$	0.07	0.25	1.01	2.37	4.49	7.45
$T = 173K$	$\eta \times 10^4$	1.13	1.29	2.08	3.57	5.96	9.42
	$\Delta\eta \times 10^4$	0.05	0.21	1.00	2.49	4.88	8.34
$T = 348K$	① λ 毫瓦/厘米·度	0.21	0.23	0.29	0.39	0.56	0.78
	① $\Delta\lambda$	0.01	0.03	0.09	0.19	0.36	0.58
	② λ	0.19	0.20	0.26	0.36	0.50	0.71
	② $\Delta\lambda$	0.01	0.02	0.08	0.18	0.32	0.53
$T = 183K$	① λ	0.12	0.13	0.19	0.30	0.49	0.76
	① $\Delta\lambda$	0.01	0.02	0.08	0.19	0.38	0.65
	② λ	0.09	0.10	0.15	0.24	0.38	0.59
	② $\Delta\lambda$	—	0.01	0.06	0.15	0.29	0.50

注: ①, ② 分别表示 λ_B 取实验值和按 (103) 式计算值.

0.115 毫瓦/厘米·秒, $\lambda_B(T = 348\text{K}) = 0.199$ 毫瓦/厘米·秒. 对于粘滞系数, 发现两者差别不大; 对于热导率, 把两者的结果都列于表 1 和图 7, 8 之中. 表 1 和图 4—8 中的 $\Delta\eta = \eta - \eta_B$, $\Delta\lambda = \lambda - \lambda_B$. 有的文献是把 $\Delta\eta$ 和 $\Delta\lambda$ 分别称之为过剩粘滞系数和过剩热导率. 实验证明, 在高密度区 $\Delta\eta$ 和 $\Delta\lambda$ 只与密度 ρ 有关, 而与温度无关^[5], 这与本文给出的图 5 至图 8 的理论曲线是一致的. 由表 1 看出, 无论是 $\Delta\eta(T = 348\text{K})$ 与 $\Delta\eta(T = 173\text{K})$ 之间的数值还是 $\Delta\lambda(T = 348\text{K})$ 与 $\Delta\lambda(T = 183\text{K})$ 之间的数值, 差别不大.

图 4 给出了 $T = 348\text{K}$ 时粘滞系数随密度而改变的实验值和本文理论计算曲线、恩斯柯克理论线、MET 理论线之间的比较. 由图 4 可知, 在估计了气体分子之间的吸引势和粒子之间的位置关联之后, 本文 (91) 式给出的理论曲线, 较之恩斯柯克的理论线有显著的改进; 较之以实验的 ρ, V, T 数据为基础的 MET 理论线也更靠近实验结果. 一直到密度 $\rho = 1-1.2$ 克/立方厘米, 计算值仍与实验值有较好的符合. 因氩的临界密度为 0.537 克/厘米³, 临界温度为 150.86K, 所以 $\rho = 1.2$ 克/立方厘米, 这就是说, 密度约为临界密度的两倍多.

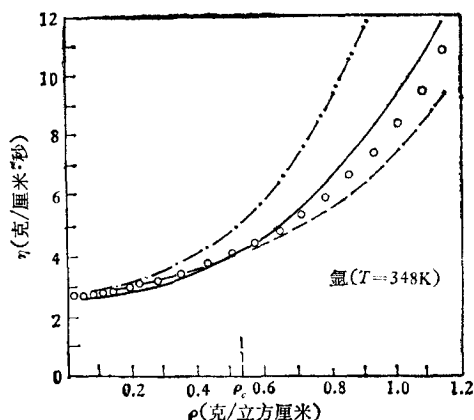


图 4 氩在 348K 时粘滞系数随密度而改变的实验值与理论计算曲线的比较

○ 为实验点^[5,6]; — · — 为恩斯柯克理论曲线;
—— 为 MET 理论曲线; — 为本文计算曲线

0.537 克/厘米³, 临界温度为 150.86K, 所以 $\rho = 1.2$ 克/立方厘米, 这就是说, 密度约为临界密度的两倍多.

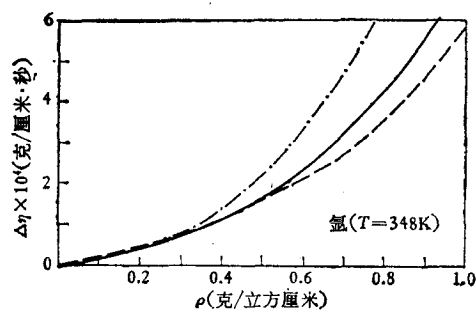


图 5 氩在 348K 时, $\Delta\eta = \eta - \eta_B$ 随密度改变的实验值与理论计算曲线的比较

—— 为实验曲线^[5,6]; — · — 为恩斯柯克理论曲线; — 为本文计算曲线

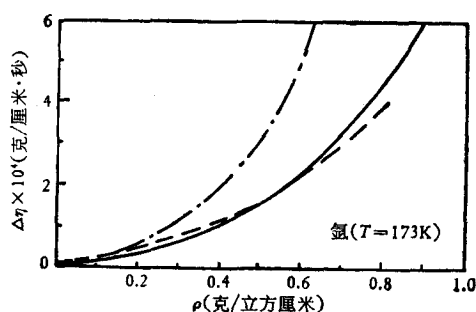


图 6 氩在 173K 时, $\Delta\eta = \eta - \eta_B$ 随密度而改变的实验值与理论计算曲线的比较

—— 为实验曲线^[6]; — · — 为恩斯柯克理论曲线; — 为本文计算曲线

由图 5 至 8 可见, 在较低温度时, 如 173K 和 183K 时, 本文计算的结果, 虽然仍然比恩斯柯克的理论曲线有明显的改善, 但是在高密度区域, 偏离就比较大. 这说明, 在低温高密度区, 稠密气体中分子之间的相互作用势的影响越来越变得重要, 这时可能速度关联的影响变得不能忽略, 而后者是本文所没有估计的, 需另作专门讨论.

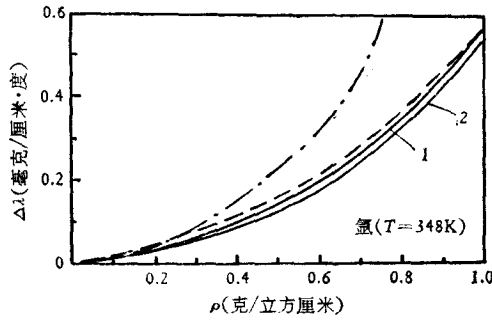


图7 氩在 348K 时, $\Delta\lambda = \lambda - \lambda_B$ 随密度而改变的实验值与理论计算曲线比较
曲线 1 为 λ_B 取实验数据; 曲线 2 为 λ_B 取计算值; 图中各曲线所表示的意义同图 5

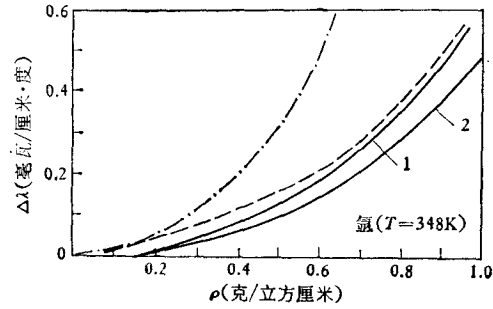


图8 氩在 183K 时, $\Delta\lambda = \lambda - \lambda_B$ 随密度而改变的实验值与理论计算曲线比较
曲线 1 为 λ_B 取实验数据; 曲线 2 为 λ_B 取计算值; 图中各曲线所表示的意义同图 6

作者对王竹溪教授在完成此工作中给予的关心和指导表示谢意。

附 录 一

整个理论处理过程中, 用到以下积分公式:

$$\int_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) > 0} \mathbf{k} \mathbf{k} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2 d\mathbf{k} = \frac{2}{15} \pi \left(2\mathbf{g} \mathbf{g} + \frac{5}{3} g^2 \mathbf{U} \right), \quad (\text{A.1})$$

$$\begin{aligned} \int_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) > 0} \mathbf{k} \mathbf{k} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) [(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2 + \omega^2]^{1/2} d\mathbf{k} &= \frac{\pi}{15} \left\{ \left[\frac{(g^2 + \omega^2)^{3/2}}{g^3} (4g^2 - 6\omega^2) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\omega^3}{g^3} (5g^2 + 6\omega^2) \right] \mathbf{g} \mathbf{g} + \frac{10}{3} \left[\frac{(g^2 + \omega^2)^{3/2}}{g^3} - \frac{\omega^3}{g^3} \right] g^2 \mathbf{U} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

$$\int_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) < -\omega} \mathbf{k} \mathbf{k} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2 d\mathbf{k} = -\frac{\pi}{15} \left\{ \left(4 - 9 \frac{\omega^2}{g^2} + 5 \frac{\omega^4}{g^4} \right) \mathbf{g} \mathbf{g} + \frac{10}{3} \left(1 - \frac{\omega^2}{g^2} \right) g^2 \mathbf{U} \right\}, \quad (\text{A.3})$$

$$\begin{aligned} \int_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) < -\omega} \mathbf{k} \mathbf{k} [(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2 - \omega^2]^{1/2} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k} &= \frac{\pi}{15} \left\{ \frac{(g^2 - \omega^2)^{3/2}}{g^3} (4g^2 + 6\omega^2) \mathbf{g} \mathbf{g} \right. \\ &\quad \left. + \frac{10}{3} \frac{(g^2 - \omega^2)^{3/2}}{g^3} g^2 \mathbf{U} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

$$\begin{aligned} \int_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) > 0} \mathbf{k} \mathbf{k} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) \{ (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) + [(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2 + \omega^2]^{1/2} \} d\mathbf{k} &= \frac{\pi}{15} \left\{ \left[4 + \frac{(g^2 + \omega^2)}{g^2} (4g^2 - 6\omega^2) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\omega^3}{g^3} (5g^2 + 6\omega^2) \right] \mathbf{g} \mathbf{g} + \frac{10}{3} \left[1 + \frac{(g^2 + \omega^2)^{3/2}}{g^3} - \frac{\omega^3}{g^3} \right] g^2 \mathbf{U} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

$$\begin{aligned} \int_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) < -\omega} \mathbf{k} \mathbf{k} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) \{ (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) - [(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2 - \omega^2]^{1/2} \} d\mathbf{k} &= -\frac{\pi}{15} \left\{ \left[4 - 9 \frac{\omega^2}{g^2} - 5 \frac{\omega^4}{g^4} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{(g^2 - \omega^2)^{3/2}}{g^3} (4g^2 + 6\omega^2) \right] \mathbf{g} \mathbf{g} + \frac{10}{3} \left[\left(1 - \frac{\omega^2}{g^2} \right) + \frac{(g^2 - \omega^2)^{3/2}}{g^3} \right] g^2 \mathbf{U} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

$$\int_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) > 0} (\lambda \cdot \mathbf{k}) (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2 \mathbf{k} d\mathbf{k} = \frac{1}{12} \pi \left[(\lambda \cdot \mathbf{g}) (\mathbf{g} \mathbf{g} + g^2 \mathbf{U}) \frac{1}{g} + g (\lambda \mathbf{g} + \mathbf{g} \lambda) \right], \quad (\text{A.7})$$

$$\begin{aligned} \int_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) > 0} (\lambda \cdot \mathbf{k}) (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) [(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2 + \omega^2]^{1/2} d\mathbf{k} &= \pi (A - B) \left\{ (\lambda \cdot \mathbf{g}) \left[\mathbf{g} \mathbf{g} \left(\frac{5B - 3A}{A - B} \right) + g^2 \mathbf{U} \right] \frac{1}{g} \right. \\ &\quad \left. + g (\lambda \mathbf{g} + \mathbf{g} \lambda) \right\}, \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

其中

$$A = \int_0^1 x^2 \left(x^2 + \frac{\omega^2}{g^2} \right)^{1/2} dx = \frac{1}{4} \left[\left(1 + \frac{\omega^2}{g^2} \right)^{3/2} - \frac{1}{2} \frac{\omega^2}{g^2} \left(1 + \frac{\omega^2}{g^2} \right)^{1/2} - \frac{1}{2} \left(\frac{\omega^4}{g^4} \right) \text{Arsh} \frac{g}{\omega} \right]$$

$$B = \int_0^1 x^4 \left(x^2 + \frac{\omega^2}{g^2} \right)^{1/2} dx = \left[\frac{1}{6} \left(1 + \frac{\omega^2}{g^2} \right)^{3/2} - \frac{7}{24} \frac{\omega^2}{g^2} \left(1 + \frac{\omega^2}{g^2} \right)^{1/2} \right]$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{16} \frac{\omega^4}{g^4} \left(1 + \frac{\omega^2}{g^2}\right)^{1/2} + \frac{1}{16} \frac{\omega^6}{g^6} \operatorname{Arsh} \frac{g}{\omega} \Big]. \\
& \int_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) < -\omega} (\lambda \cdot \mathbf{k})(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})[(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2 - \omega^2]^{1/2} d\mathbf{k} = \pi(A' - B') \left\{ (\lambda \cdot \mathbf{g}) \left[\mathbf{g} \mathbf{g} \left(\frac{5B' - 3A'}{A' - B'} \right) + g^2 \mathbf{U} \right] \frac{1}{g} \right. \\
& \left. + g(\lambda \mathbf{g} + \mathbf{g} \lambda) \right\}, \quad (\text{A.9})
\end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}
A' &= \int_{\omega/g}^1 x^2 \left(x^2 - \frac{\omega^2}{g^2}\right)^{1/2} dx = \frac{1}{4} \left[\left(1 - \frac{\omega^2}{g^2}\right)^{3/2} + \frac{1}{2} \frac{\omega^2}{g^2} \left(1 - \frac{\omega^2}{g^2}\right)^{1/2} - \frac{1}{2} \left(\frac{\omega^4}{g^4}\right) \operatorname{Arch} \frac{g}{\omega} \right] \\
B' &= \int_{\omega/g}^1 x^4 \left(x^2 - \frac{\omega^2}{g^2}\right)^{1/2} dx = \frac{1}{6} \left(1 - \frac{\omega^2}{g^2}\right)^{5/2} + \frac{7}{24} \frac{\omega^2}{g^2} \left(1 - \frac{\omega^2}{g^2}\right)^{3/2} \\
& + \frac{1}{16} \frac{\omega^4}{g^4} \left(1 - \frac{\omega^2}{g^2}\right)^{1/2} - \frac{1}{16} \frac{\omega^4}{g^4} \operatorname{Arch} \frac{g}{\omega}.
\end{aligned}$$

附 录 二

在文献[7]的202页已经证明:

$$\begin{aligned}
J_1 &= \int dV_l \left[\left(\frac{5}{2} - W^2 \right) \mathbf{W} \right] \mathbf{W} S_{11}^{(1)}(W^2) = \frac{\sqrt{2}}{64} \frac{Y}{\pi^{3/2}} \iiint \exp \left(-\frac{1}{2} \mathcal{G}^2 \right) \\
& \times [\mathcal{G}^4 + \mathcal{G}'^4 - 2(\mathcal{G} \cdot \mathcal{G}')^2] g b d b d \varepsilon d \mathcal{G}. \quad (\text{A.10})
\end{aligned}$$

这里的 $\mathcal{G} = \mathbf{W} - \mathbf{W}_1$. 对于有四种分部碰撞的情况,有

$$\begin{aligned}
J_1 &= \frac{\sqrt{2}}{64\pi^{3/2}} \left(\frac{2kT}{m} \right)^{1/2} \left\{ Y_1 \sigma_1^2 \iiint_{(\mathcal{G} \cdot \mathbf{k}) > 0} e^{-1/2 \mathcal{G}^2} [\mathcal{G}^4 + \mathcal{G}'^4 - 2(\mathcal{G} \cdot \mathcal{G}')^2] (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{k} d\mathcal{G} \right. \\
& \left. + Y_2 \sigma_2^2 \iiint_{(\mathcal{G} \cdot \mathbf{k}) > 0} + Y_2 \sigma_2^2 e^{\varepsilon^2} \iiint_{\mathcal{G} > \sqrt{2}s} + Y_2 \sigma_2^2 e^{\varepsilon^2} \iiint_{\mathcal{G} < \sqrt{2}s} \right\}. \quad (\text{A.11})
\end{aligned}$$

应用(32)式和(41)至(43)式,可以求得

$$\begin{aligned}
& \text{当 } (\mathcal{G} \cdot \mathbf{k}) > 0, r_{ii} = \sigma_1 \text{ 和 } \mathcal{G} < \sqrt{2}s, r_{ii} = \sigma_2 \text{ 时,} \\
& \mathcal{G}^4 + \mathcal{G}'^4 - 2(\mathcal{G} \cdot \mathcal{G}')^2 = 2\mathcal{G}^4 [1 - (1 - 2\cos^2\theta)]. \quad (\text{A.12})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \text{当 } (\mathcal{G} \cdot \mathbf{k}) > 0, r_{ii} = \sigma_2 \text{ 和 } \mathcal{G} > \sqrt{2}s, r_{ii} = \sigma_2 \text{ 时, 分别有} \\
& \mathcal{G}^4 + \mathcal{G}'^4 - 2(\mathcal{G} \cdot \mathcal{G}')^2 = 2\mathcal{G}^4 + 2[\mathcal{G}^2 - 2(\mathcal{G} \cdot \mathbf{k})^2]^2 - 4\{s^2(\mathcal{G} \cdot \mathbf{k})^2 + \mathcal{G}^2(\mathcal{G} \cdot \mathbf{k})^2 - (\mathcal{G} \cdot \mathbf{k})^4 \\
& + \mathcal{G}^2(\mathcal{G} \cdot \mathbf{k})[(\mathcal{G} \cdot \mathbf{k})^2 + 2s^2]^{1/2} - (\mathcal{G} \cdot \mathbf{k})^3[(\mathcal{G} \cdot \mathbf{k})^2 + 2s^2]^{1/2} - s^4 - \mathcal{G}^2 s^2\}, \quad (\text{A.13})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \mathcal{G}^4 + \mathcal{G}'^4 - 2(\mathcal{G} \cdot \mathcal{G}')^2 = 2\mathcal{G}^4 + 2[\mathcal{G}^2 - 2(\mathcal{G} \cdot \mathbf{k})^2]^2 - 4\{s^2(\mathcal{G} \cdot \mathbf{k})^2 + \mathcal{G}^2(\mathcal{G} \cdot \mathbf{k})^2 - (\mathcal{G} \cdot \mathbf{k})^4 \\
& - \mathcal{G}^2(\mathcal{G} \cdot \mathbf{k})[(\mathcal{G} \cdot \mathbf{k})^2 + 2s^2]^{1/2} + (\mathcal{G} \cdot \mathbf{k})^3[(\mathcal{G} \cdot \mathbf{k})^2 + 2s^2]^{1/2} - s^4 + \mathcal{G}^2 s^2\}. \quad (\text{A.14})
\end{aligned}$$

把(A.12)至(A.14)式代入(A.11)式,可得

$$J_1 = 8\pi \left(\frac{kT}{\pi m} \right)^{1/2} (Y_1 \sigma_1^2 e^{\varepsilon^2} + Y_2 \sigma_2^2 + Y_2 \sigma_2^2 e^{\varepsilon^2}) + (A + B). \quad (\text{A.15})$$

若注意到 $\mathcal{G} \cdot \mathbf{k} = \mathcal{G} \cos\theta$, $d\mathbf{k} = \sin\theta d\theta d\varphi$, 则先对 θ 积分, 然后对 $u = \frac{1}{\sqrt{2}} \mathcal{G}$ 积分, 即得

$$A = -2\sqrt{2} \sigma_1^2 \left(\frac{2\pi kT}{m} \right)^{1/2} Y_2 \left[1 - \frac{1}{2} s^2 - \frac{1}{4} s^4 + \frac{1}{2} s^2 e^{s^2/2} K_1(s^2/2) \right], \quad (\text{A.16})$$

$$B = -2\sqrt{2} \sigma_2^2 \left(\frac{2\pi kT}{m} \right)^{1/2} Y_2 \left[1 + \frac{3}{2} s^2 - \frac{1}{4} s^4 + \frac{1}{2} s^2 e^{s^2/2} K_1(s^2/2) \right]. \quad (\text{A.17})$$

把(A.16)和(A.17)式代入(A.15)式, 即得正文中的(84)式. 在得到(A.16)和(A.17)式过程中, 应用了以下积分等式:

$$\begin{aligned}
& \int_0^\infty e^{-u^2} u^7 \left[\int_0^1 x^2 (u^2 x^2 + s^2)^{1/2} dx - \int_0^1 x^4 (u^2 x^2 + s^2)^{1/2} dx \right] du \\
& = \int_0^\infty e^{-u^2 + s^2} u^7 \left[\int_{s/u}^1 x^2 (x^2 u^2 - s^2)^{1/2} dx - \int_{s/u}^1 x^4 (x^2 u^2 - s^2)^{1/2} dx \right] du \\
& = \frac{s^2}{8} e^{s^2/2} K_1(s^2/2). \quad (\text{A.18})
\end{aligned}$$

附 录 三

因为

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_i^{(1)} &= \int m \mathbf{V} \mathbf{V} f^{(0)} \Phi d\mathbf{p} = nm \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \int \mathbf{V} \mathbf{V} e^{-\frac{m}{2kT} V^2} b_0^{(1)} \left(\mathbf{W}^\circ \mathbf{W} : \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v}_0 \right) \\ &= \frac{2nkT}{\pi^{3/2}} b_0^{(1)} \int d\mathbf{W} e^{-W^2} (\mathbf{W}^\circ \mathbf{W} : \mathbf{W}^\circ \mathbf{W}) \mathbf{S} = nbT b_0^{(1)} \mathbf{S}, \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

其中形变速率张量

$$\mathbf{S} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v}_0 = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v}_0 + \overline{\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v}_0} \right) - \frac{1}{3} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{v}_0 \right) \mathbf{U}. \quad (\text{A.20})$$

由 (16) 式知

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{\Phi}^{(1)} &= \mathbf{P}_{\Phi_1}^{(1)} + \mathbf{P}_{\Phi_2}^{(1)} = \frac{\sigma^3}{2} Y \iiint m(\mathbf{V}' - \mathbf{V}) f_i^{(0)} f_i^{(0)} (\Phi + \Phi_1) (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) k d\mathbf{k} d\mathbf{V} d\mathbf{V}_1 \\ &\quad + \frac{\sigma^4}{4} Y \iiint m(\mathbf{V}' - \mathbf{V}) f_i^{(0)} f_i^{(0)} \left(\mathbf{k} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \ln \frac{f_i^{(0)}}{f_i^{(0)}} \right) (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) k d\mathbf{k} d\mathbf{V} d\mathbf{V}_1. \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

故

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{\Phi_1}^{(1)} &= \frac{1}{2} \sigma_1^3 Y_1 e^{s^2} \iiint_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) > 0} f^{(0)} f_i^{(0)} (\Phi + \Phi_1) (\mathbf{g} \cdot \mathbf{k})^2 k d\mathbf{k} d\mathbf{V} d\mathbf{V}_1 + \frac{1}{2} \sigma_2^3 Y_2 \iiint_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) > 0} \\ &\quad + \frac{1}{2} \sigma_2^3 Y_2 e^{s^2} \iiint_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) > -\omega} + \frac{1}{2} \sigma_2^3 Y_2 e^{s^2} \iiint_{(\mathbf{g} \cdot \mathbf{k}) < -\omega} + (\mathbf{A}_{\Phi_1} + \mathbf{B}_{\Phi_2}). \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

上式右边的前四项的积分, 可以参阅文献 [7] 的 541 页完成, 得

$$\mathbf{P}_{\Phi_1}^{(1)} = -\frac{1}{5} n^2 kT \beta_1 Y b_0^{(1)} \mathbf{S} + (\mathbf{A}_{\Phi_1} + \mathbf{B}_{\Phi_2}), \quad (\text{A.23})$$

其中 $\mathbf{A}_{\Phi_1}$ 和 $\mathbf{B}_{\Phi_1}$ 在应用 (A.5) 和 (A.6) 式完成对 $\mathbf{k}$ 的积分, 再作变量变换 $(\mathbf{V}, \mathbf{V}_1) \rightarrow (\mathbf{g}, \mathbf{G}_0)$, 并注意到

$$\begin{aligned} \Phi + \Phi_1 &= b_0^{(1)} \left(-\frac{m}{kT} \right) \left[\left(\mathbf{V} \mathbf{V} - \frac{1}{3} V^2 \mathbf{U} \right) + \left(\mathbf{V}_1 \mathbf{V}_1 - \frac{1}{3} V_1^2 \mathbf{U} \right) \right] : \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v}_0 \\ &= 2b_0^{(1)} \left(\frac{m}{2kT} \right) \left\{ \mathbf{G}_0 \mathbf{G}_0 + \frac{1}{4} \mathbf{g} \mathbf{g} - \frac{1}{3} \left(G_0^2 + \frac{1}{4} g^2 \right) \mathbf{U} \right\} : \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v}_0, \end{aligned}$$

完成对 $\mathbf{G}_0$ 的积分, 可得

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{\Phi_1} &= -\frac{1}{4\sqrt{2}} \left(\frac{m}{kT} \right) \frac{\pi^2 m}{225} b_0^{(1)} \sigma_1^3 Y_1 n^2 \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \mathbf{S} \int_0^\infty e^{-m g^2/4kT} [4g^6 \\ &\quad + g(g^2 + \omega^2)^{3/2}(4g^2 - 6\omega^2) + \omega^3 g(5g^2 + 6\omega^2)] dg, \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_{\Phi_1} &= -\frac{1}{4\sqrt{2}} \left(\frac{m}{kT} \right) \frac{\pi^2 m}{225} b_0^{(1)} \sigma_1^3 Y_1 n^2 \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \mathbf{S} e^{s^2} \int_\omega^\infty e^{-m g^2/4kT} [-4g^6 \\ &\quad + 9g\omega^5 - 5\omega^3 g^3 - g(g^2 - \omega^2)^{3/2}(4g^2 + 6\omega^2)] dg. \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

对 $\mathbf{A}_{\Phi_1}$ 和 $\mathbf{B}_{\Phi_1}$ 引进无量纲的相对速度 $\mathcal{G}^2 = \left(\frac{m}{4kT} \right) \mathcal{G}^2$, 再对 $\mathbf{B}_{\Phi_1}$ 作变量变换 $\mathcal{G}^2 = u^2 + s^2$ 后, 即可得

$$\mathbf{A}_{\Phi_1} + \mathbf{B}_{\Phi_1} = \frac{2}{15} kT n^2 \pi \sigma_1^3 Y_1 s^2 b_0^{(1)} \left[1 + \frac{4}{3} \frac{e^{s^2}}{\pi^{1/2}} \Gamma\left(\frac{5}{2}, s^2\right) - \frac{4}{3} \frac{s^3}{\pi^{1/2}} \right] \mathbf{S}, \quad (\text{A.26})$$

其中

$$\Gamma\left(\frac{5}{2}, s^2\right) = \int_{s^2}^\infty e^{-t} t^{3/2} dt. \quad (\text{A.27})$$

故

$$\mathbf{P}_{\Phi_1}^{(1)} = -\left\{ \frac{1}{5} n^2 kT \beta_1 Y b_0^{(1)} - \frac{4}{15} kT n^2 \pi \sigma_1^3 Y_1 b_0^{(1)} [\Psi(s^2) + e^{s^2} - 1] \right\} \mathbf{S}. \quad (\text{A.28})$$

用类似的过程, 可求得

$$\mathbf{P}_{\Phi_2}^{(1)} = -\frac{8}{15} n^2 (\pi m kT)^{1/2} \left[Y_1 \sigma_1^4 e^{s^2} + Y_2 \sigma_2^4 \Xi(s^2) - \frac{1}{4} Y_2 \sigma_2^4 s^4 \right]$$

$$\cdot \left[\mathbf{S} + \frac{5}{6} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{v}_0 \right) \mathbf{U} \right]. \quad (\text{A.29})$$

在得到 (A.29) 式过程中, 还用到以下等式:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \ln \frac{f^{(0)}}{f_1^{(0)}} = \frac{m}{2kT} (V^2 - V_1^2) \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \ln T + \frac{m}{kT} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v}_0 \right) \cdot (\mathbf{V} - \mathbf{V}_1), \quad (\text{A.30})$$

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \mathcal{G}^2 e^{-\mathcal{G}^2} (A - B) \frac{1}{\mathcal{G}} \left(\mathbf{g} \mathbf{g} : \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v}_0 \right) \left(\mathbf{g} \mathbf{g} \frac{5B - 3A}{A - B} + \mathcal{G}^2 \mathbf{U} \right) d\mathcal{G} \\ &= \frac{2}{15} \mathbf{S} \int_0^\infty \mathcal{G}^3 (5B - 3A) e^{-\mathcal{G}^2} d\mathcal{G} + \frac{2}{9} \int_0^\infty B \mathcal{G}^3 e^{-\mathcal{G}^2} d\mathcal{G} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{v}_0 \right) \mathbf{U}, \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \mathcal{G}^3 e^{-\mathcal{G}^2} (A - B) \left[\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{g} \right) \mathbf{g} + \mathcal{G} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{g} \right) \right] d\mathcal{G} \\ &= \frac{2}{3} \mathbf{S} \int_0^\infty e^{-\mathcal{G}^2} \mathcal{G}^3 (A - B) d\mathcal{G} + \frac{2}{9} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{v}_0 \right) \mathbf{U} \int_0^\infty (A - B) e^{-\mathcal{G}^2} \mathcal{G}^3 d\mathcal{G}, \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

$$e^{i^2} \int_0^\infty e^{-\mathcal{G}^2} \mathcal{G}^3 A' d\mathcal{G} = \int_0^\infty e^{-\mathcal{G}^2} \mathcal{G}^3 A d\mathcal{G}, \quad (\text{A.33})$$

$$\int_0^\infty e^{-\mathcal{G}^2} \mathcal{G}^3 A d\mathcal{G} + e^{i^2} \int_0^\infty e^{-\mathcal{G}^2} \mathcal{G}^3 A' d\mathcal{G} = \frac{s^2}{4} e^{i^2/2} K_1(s^2/2). \quad (\text{A.34})$$

参 考 文 献

- [1] H. T. Davis, S. A. Rice and J. K. Sengers, *J. Chem. Phys.*, **35**(1961), 2210; **69**(1965), 869.
- [2] K. D. Luks, M. A. Miller and H. T. Davis, *Amer. Inst. Chem. Engineers J.* **12**(1966), 1078.
- [3] K. E. Gubbins, in: *Statistical Mechanics-vol. 1, Specialist Periodical Report*, (1972), 194.
- [4] J. V. Sengers, *Int. J. Heat Mass Transfer*, **8**(1965), 1103.
- [5] J. V. Sengers, in: *Recent Advances in Engineering Science* (ed. by A. C. Eringen), (1968), 153.
- [6] H. J. M. Hanley, R. D. McCarty and E. G. D. Cohen, *Physica*, **60**(1972), 322; **83A**(1976), 215.
- [7] J. H. Ferziger and H. G. Kaper, *Mathematical Theory of Transport Processes in Gases*, Amsterdam, (1972).
- [8] J. R. Dorfman and H. van Beijeren, in: *Statistical Mechanics, Pt. B: Time-dependent Processes*, (B. J. Berne, ed.) N. Y. (1977).
- [9] J. O. Hirschfelder, C. F. Curtiss and R. B. Bird, *Molecular Theory of Gases and Liquids*, Wiley, N. Y., (1954).
- [10] S. Chapman and T. G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, 3rd. ed. Cambridge University Press, London, (1970).
- [11] G. V. Manuel, in: *Transport Phenomena, Lecture Notes in Physics* (ed. by J. Ehlers), (1974), 288.
- [12] 王竹溪, 统计物理学导论, 人民教育出版社, (1965).
- [13] Н. Н. Боголюбов, *ЖЭТФ*, **16** (8) (1946), 691.
- [14] Н. Н. Боголюбов, *Проблемы динамической теории в статистической физике, м-л*, (1946).
- [15] S. T. Choh and G. E. Uhlenbeck, *The Kinetic Theory of Phenomena in Dense Gases*, Navy Theoret. Phys. Contract No. Nonr., 1224(15), (1958).
- [16] G. E. Uhlenbeck and G. W. Ford, *Lectures on Statistical Mechanics*, American Math. Society, Island, (1963).
- [17] E. G. D. Cohen, *Physica*, **28**(1962), 1025; 1045; 1060.
- [18] B. J. Alder, D. B. Gass and T. E. Wainwright, *Phys. Rev. A*, **4**(1971), 233.
- [19] T. V. Sengers, M. H. Ernst and D. T. Gillespie, *J. Chem. Phys.* **56**(1972), 5583.
- [20] 包科达, 中国科学, (4) (1979), 422.

TRANSPORT PHENOMENA IN DENSE GASES AND VISCOSITY, THERMAL CONDUCTIVITY FOR ARGON OF MOLECULES INTERACTING WITH A SQUARE-WELL POTENTIAL

Bao Ke-da

(Department of Physics, Beijing University)

ABSTRACT

In order to discuss the transport phenomena in dense gases, a generalized Enskog's equation is suggested. We notice that the correlation function $Y(\mathbf{r})$ can be obtained from virial expansion of the equation of state.

In this paper, formulas for calculating viscosity and thermal conductivity for dense gases of molecules interacting with a square-well potential are derived. Using these formulas, we have calculated the viscosity for argon at temperatures 173 K and 348 K and the thermal conductivity for argon at temperatures 183 K and 348 K. Comparison of theoretical results with the experimental measurements shows that the agreement is good and is better than another theoretical calculations made so far.