关于碰撞截面的讨论

曾丹丹

中国科学院力学研究所，高温气体动力学国家重点实验室（筹），北京海淀区 100190

摘要 本文以单组分平衡态 Lennard-Jones 模型的粒子为对象。以两个粒子的最短距离为判别其是否发生碰撞的标准，对平衡态粒子的碰撞截面进行了分析和计算。通过解析求解，得到了两种特殊情况下碰撞截面随温度变化的解析表达式。通过编程计算，得到了一般情况下碰撞截面与温度的数值关系。

关键词 碰撞截面，最短距离，瞄准距离，温度

引 言

碰撞频率是指单个粒子在单位时间内与其他粒子发生碰撞的频率。碰撞截面是指在该截面范围内的粒子将与其发生碰撞。碰撞截面影响质量、动量和能量的输运。以下是以距离为判别标准对碰撞频率和碰撞截面的一些计算。

1 模型及化简

1.1 Lennard-Jones 模型

Lennard-Jones 模型：

$$\phi = 4\varepsilon\left[\left(\frac{D}{r}\right)^{12} - \left(\frac{D}{r}\right)^{6}\right]$$

$$\frac{FD}{4\varepsilon}$$

其中，ϕ 为势能，ε 为特征势能，D 为势能零点的距离，r 是粒子间的距离。Lennard-Jones 模型描述的粒子间的相互作用力及势能具有如图 1 所示的特征。

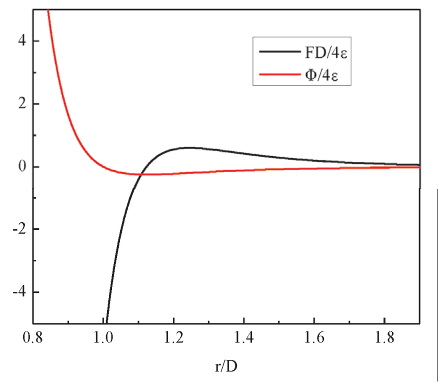

图 1 Lennard-Jones 模型的势能和作用力

两个粒子的碰撞过程中满足相对运动的能量守恒及角动量守恒。即

$$r^2\frac{d\theta}{dt} = bc_r$$

$$\frac{1}{2}m_r\left[\left(\frac{dr}{dt}\right)^2 + r^2\left(\frac{d\theta}{dt}\right)^2\right] + 4\varepsilon\left[\left(\frac{D}{r}\right)^{12} - \left(\frac{D}{r}\right)^{6}\right] = \frac{1}{2}m_r c_r^2$$

其中，m_r 为折合质量。

进行以下变量代换，

$$W = \frac{b}{r}, x = \frac{b}{D}, y = \frac{m_r c_r^2}{2\varepsilon}$$

碰撞过程中，其中一个粒子相对于另一个粒子的运动轨迹可由以下方程表示：

$$\left(\frac{dW}{d\theta}\right)^2 + W^2 + \frac{4\left(W^{12} - W^6 x^6\right)}{yx^{12}} = 1$$

在最短距离对应的 W_m 处，满足

$$\frac{dW}{d\theta} = 0, W_m^2 + \frac{4\left(W_m^{12} - W_m^6 x^6\right)}{yx^{12}} = 1$$

碰撞前后的转角可以 χ 表示，$\chi = \pi - 2\theta$

而

$$\theta = \varphi(x, y) = \int_0^{W_m}\left[1 - W^2 - \frac{4\left(W^{12} - W^6 x^6\right)}{yx^{12}}\right]^{-\frac{1}{2}} dW$$

从以上各式中可以看出，对于某一特定物质，碰撞过程中两个粒子的最短距离和碰撞前后的转角是由瞄准距离和相对运动的速度决定的。

1.2 问题化简

为了将问题尽量化简，本文只考虑平衡态的气体。由于平衡态的气体的分布函数已知，

因此可通过定义及以上控制方程来计算得到碰撞截面。也就是，

$$\nu = n\overline{c}_r\sigma_T = \int_0^{+\infty} 2\pi b db \int_0^{c_{r,m}(b)} nc_r f(c_r) dc_r$$

其中[1]，

$$\overline{c}_r = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m_r}}, f(c_r) = \frac{4m_r^{1.5}}{\pi^{0.5}(2kT)^{1.5}} c_r^2 \exp(-\frac{m_r c_r^2}{2kT})$$

判别两个粒子在运动过程中是否发生碰撞，作者认为最简单的有两种办法。一是以两个粒子在“碰撞”前后的转角，二是两个粒子在运动过程的最短距离。本文主要是针对后一种方法进行讨论，也就是，若两个粒子间的最短距离小于或等于某个距离时，认为碰撞发生。另外，对这个阈值距离的选定并没有理论上的依据。

容易看出，σ_T 与平衡态温度及阈值距离有关。阈值距离用量纲为 1 的量 $\lambda = r_m/D$ 表示。温度用另一个量纲为 1 的量 $z = \varepsilon / kT$ 表示。并设 $\sigma' = \sigma_T / \pi D^2$，通过一系列简化，可得到以下对碰撞截面的无量纲量的表示式：

$$\sigma'(\lambda, z) = \int_0^{+\infty} x\left[\frac{1}{z} - \exp(-y_m z)\left(y_m + \frac{1}{z}\right)\right]dx$$

其中，y_m 是 λ 和的 x 的函数，可以理解为在某一给定瞄准距离，能进入阈值距离下的最大动能。

由于本文讨论的 λ 都大于 1 或等于 1，因此上式又可化为：

$$\sigma'(\lambda, z) = 1 + \int_1^{+\infty} x\left[\frac{1}{z} - \exp(-y_m z)\left(y_m + \frac{1}{z}\right)\right]dx$$

2 计算结果

2.1 解析结果

Lennard-Jones 模型本身较为复杂的表示使得仅对于少数几个特殊的阈值距离才能得至 σ_T 的解析表达式。一个是 $r_m = D$，对应势能零点，另一个是 $r_m = \sqrt[6]{2}D$，对应于作用力零点。在这两种情况下，可通过积分求得 σ_T 随温度的变化分别如下：

$$\sigma_T = \pi D^2$$

$$\sigma_T = \pi D^2 2^{\frac{1}{3}}\left(1 + \frac{\varepsilon}{2kT}\right)$$

或者写成

$$\sigma' = 1$$

$$\sigma' = 2^{\frac{1}{3}}\left(1 + \frac{z}{2}\right)$$

从以上可以看出，当以势能 0 点的距离为阈值距离时，碰撞截面不随温度变化。这很容易理解，因为无穷远处也是势能 0 点，因此一个粒子能否进入另一个粒子的阈值距离范围以内仅与它们的瞄准距离有关而与相对运动速度无关。

如果以作用力 0 点处的距离为阈值距离，则情况大为不同。从式中易知，此时的 σ_T 的第一项即作用力 0 点的横截面，第二项是由于远距离时相互吸引使得两个粒子靠近导致的附加碰撞面。当温度升高时，z 降低，导致附加截面减小。这很容易理解，当温度升高时，粒子运动的惯性项变强，粒子间的相互作用克服粒子的惯性运动使其相互吸引的能力相对变弱。

2.2 数值结果

如前所述，对于大多数的 λ，都不能求得 σ' 的表达式。因此本文通过数值方法，计算了 λ 取 1 到 1.02 之间共 11 个值时的 σ' 随 z 的变化趋势，如图 2 所示。

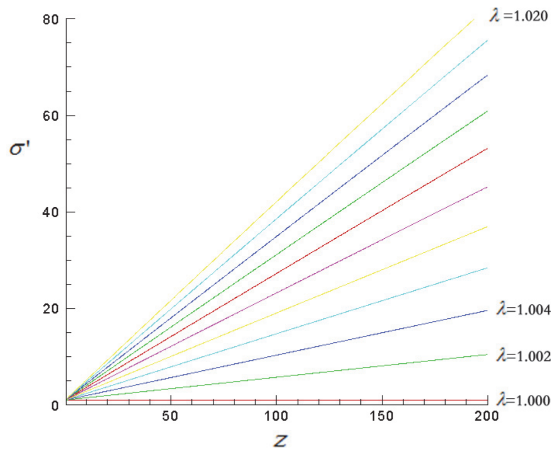

图 2 不同 λ 下 σ' 与 z 的关系

从图中可以看出，λ 为 1 值对应的 σ' 是常数 1，与理论上的推导结果一致，在一定程度上说明了本计算结果的正确性。同时，碰撞截面随着 λ 的增大而增大，随着温度的降低，碰撞截面也逐渐增加，结合前面解析结果部分的分析，这些都是是自然而然的。

另一方面，不论λ取何值，也不论温度高低，σ'与z的线性相关性都是很好，即，随着温度的增大，碰撞截面程反比函数关系下降。这是和解析分析中的结果是完全一致的。解析结果中，$\lambda=\sqrt[6]{2}$时，σ'与z仍为线性关系，而在数值结果中，σ'与z在λ取值是[1，1.02]的范围内一直保持着很好的线性关系，因此我们有理由预测，若以最短距离为碰撞是否发生为判别标准的话，碰撞截面与温度的关系应当满足反比例形式的函数关系。

2.3 误差估计

数值计算的误差主要是由两部分造成的，一是积分时，用有限的数值代替无穷远，二是在积分时，用分段的阶梯函数代替连续函数，如图 3 所示。前者可通过增大积分上限来降低误差，后者可通减小积分步长来降低误差。这一部分主要是讨论后一种误差。

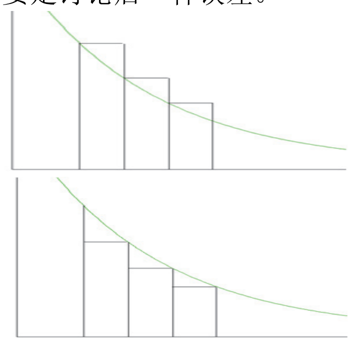

图 3 连续函数及两种阶梯函数

为了简单有效的评估用分段的阶梯函数代替连续函数积分所产生的误差，本文用上述两种阶梯函数进行了积分计算。以λ=1.006 和λ=1.014 为例，图 4 表示的是两种阶梯函数在 z=102 左右时的计算结果，其中，中间线段是它们的平均值。

从图中可以看出，两种计算结果相差很小，从输出文件的数据中更是可以具体地得到相对误差小于千分之一。

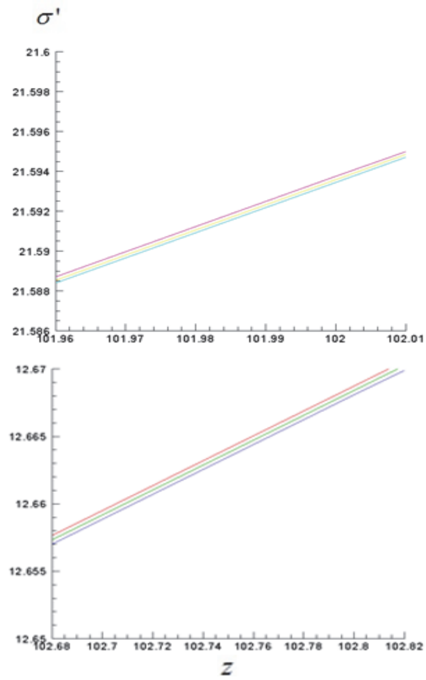

图 4 λ取 1.014 和 1.006 时的误差估计

结论

通过对平衡态单组分以 Lennard-Jones 模型为模型的粒子的碰撞截面的分析和计算发现，以最短距离为判别标准时，碰撞截面与温度接近反比例函数关系，形如：$\sigma_T=a+\dfrac{b}{T}$。

参考文献

1 Bird GA, Gas molecular dynamics. Clarendon,1976

SOME DISCUSSIONS ABOUT COLLISION CROSS-SECTION

ZENG Dandan

State Key Laboratory of High Temperature Gas Dynamics, Institute of Mechanics, C A S, No.15 Beisihuanxi Road, Beijing 100190, China

Abstract The collision cross-section were calculated for the equilibrium Lennard-Jones model. We take the shortest distance as standards distinguish whether the two particles have collided. Analytical formulations are obtained for two special conditions. For common conditions, quantitative relationships of cross section and temperature are founded by quantitative methods.

Key words collision cross-section, the shortest distance, aiming distance, temperature