

Über die Stabilität des Guderleyschen kugeligen Verdichtungsstoßes

Von WOLF HÄFELE

Aus dem Max-Planck-Institut für Physik, Göttingen

(Z. Naturforsch. **11 a**, 183—186 [1956]; eingegangen am 9. Januar 1956)

In einer früheren Arbeit wurde ein Verfahren, das an dem Phänomen der Umkehrkanten anknüpft, beschrieben, mit dessen Hilfe die Stabilität des Stoßwellentypus aus der Klasse der ebenen Homologie-Lösungen ermittelt wurde. Dasselbe Verfahren wird auf den GUDERLEYSCHEN kugeligen Verdichtungsstoß angewendet. Es stellt sich heraus, daß in genügender Nähe zum Kugelmittelpunkt Stabilität vorliegt. — Die Kenntnis der eben erwähnten Arbeit wird vorausgesetzt.

In der vorliegenden Arbeit soll die Frage beantwortet werden, inwieweit Verdichtungsstöße, die von außen nach innen auf ein Zentrum zulaufen, um dort reflektiert wieder nach außen zu gehen, beim Einlauf in der Nähe des Kugelmittelpunktes den Typ der GUDERLEYSCHEN Lösung¹ annehmen. In einer früheren Arbeit des Verfassers² war eine ähnliche Frage untersucht worden. Wie es hier die GUDERLEYSCHEN Lösung aus der Klasse der Homologie-Lösungen gibt, gibt es im ebenen Fall eine einzige Homologie-Lösung, die eine sich selbst überlassene und deshalb langsamer werdende Stoßfront darstellt³. Auch dort stellte sich die Frage, inwieweit es sich dabei um einen Prototyp handelt, dem Stoßwellen von anderem Typ mehr und mehr zustreben. Um diese Frage zu beantworten, wurde in der oben zitierten Arbeit vom Verfasser an das Phänomen der Umkehrkanten angeknüpft.

Dem Umstand entsprechend, daß Umkehrkanten mit Expansion in der Natur nicht auftreten können, weil sie zu Mehrdeutigkeiten führen, die nicht durch einen Stoß abgefangen werden können, konnte eine Gleichung gewonnen werden, die für Lösungen, die schon beinahe homolog sind, Aussagen über deren weiteres Verhalten gestattet. Die dort abgeleiteten Zusammenhänge werden hier auf die GUDERLEYSCHEN Homologie-Lösung angewendet, wobei gewisse Schwierigkeiten in Kauf genommen werden.

Die Frage nach der Stabilität der GUDERLEYSCHEN Lösung ist bereits vor einigen Jahren⁴ untersucht worden. Dabei wurde die Methode kleiner Störungen angewendet und die entstehenden etwas umfangreichen Gleichungen mittels LAPLACE-Transformation gelöst. Das Ergebnis war, daß im allgemeinen die GUDERLEYSCHEN Lösung stabil ist. Prof. FRIED-

RICHS, New York, forderte den Verfasser auf, dieselbe Frage mit der Methode der verbotenen Umkehrkanten zu behandeln, um so eine Ergänzung zu schaffen. Das soll in dieser Arbeit geschehen. Wir schließen direkt unter Bezugnahme auf bestimmte Formeln an die oben zitierte Arbeit² des Verfassers an und verstehen die hier vorliegende Arbeit als Fortsetzung dieser Arbeit.

Der Ausdruck, aus dem das weitere Verhalten einer nicht genau homologen Lösung folgte, lautete [s. B, II (26)]

$$\Re - \beta(t) s - \gamma(t) (v(\alpha - 2) + 2) = 0. \quad (1)$$

Dabei galt

$$\Re = \alpha \alpha' - v((\alpha - 2) n' + \alpha) - 2 n', \quad (2)$$

$$\beta(t) = (dn/dt) \lambda(t), \quad (3)$$

$$s = \left\{ - (v - 1) \frac{\partial \ln \varrho}{\partial n} + \alpha \frac{\partial v}{\partial n} + 2 \frac{\partial \mu}{\partial n} \right\}, \quad (4)$$

$$\gamma(t) = 1/n - d\lambda/dt, \quad (5)$$

$$\lambda(t) = \frac{\int_0^t n(\tau) \tau^{n(\tau)-1} d\tau}{n(t) t^{n(t)-1}}, \quad (6)$$

$$n' = 1 - 1/n. \quad (7)$$

Die Größen μ , v und ϱ sind durch den Ansatz definiert:

$$\begin{aligned} u &= n(t) t^{n(t)-1} v(\xi, n) \\ a^2 &= n^2(t) t^{2n-1} \mu^2(\xi, n) \\ \varrho &= \varrho(\xi, n) \\ \xi &= x / \int_0^t n(\tau) \tau^{n(\tau)-1} d\tau; \end{aligned} \quad (8)$$

u ist dabei die Strömungsgeschwindigkeit, a die

¹ G. GUDERLEY, Luftfahrtforsch. **19**, 302 [1942], S. 302 ff.

² W. HÄFELE, Z. Naturforsch. **10 a**, 1017 [1955], im folgenden als B zitiert.

³ W. HÄFELE, Z. Naturforsch. **10 a**, 1006 [1955].

⁴ Miss C. MORAWETZ, bisher noch unveröffentlichte master thesis, COURANTSches Institut, New York.



Schallgeschwindigkeit und ϱ die Dichte. x ist die Ortskoordinate und t die Zeit.

Beim Homologie-Ansatz ist n eine Konstante. Dann gehen die Größen ν , μ , ϱ über in

$$\nu \rightarrow \nu_H, \quad \mu \rightarrow \mu_H, \quad \varrho \rightarrow \varrho_H.$$

Der Index H soll auf „Homologie“ hindeuten.

κ ist das Verhältnis der spezifischen Wärmen, gemäß der GUDERLEYSchen Arbeit soll gelten

$$\kappa = 1,4.$$

α ist ein „Krümmungsmaß“: $\alpha = 0$ ebener Fall, $\alpha = 1$ zylindrischer Fall, $\alpha = 2$ kugelig Fall.

Im ebenen Fall folgt aus (2), daß \Re die einfache Form

$$\Re_{(\alpha=0)} = -n'(\nu(\kappa-2)+2) \quad (9)$$

annimmt.

Dieser Ausdruck stimmt bis auf den Faktor n' mit dem letzten Klammerausdruck in (1) überein. Das hat zur Folge, daß im ebenen Fall (1) die einfache Form (10) annimmt:

$$\beta(t) s = \Re_{(\alpha=0)} (\gamma(t) + n'). \quad (10)$$

Für $n = \text{const}$ erkennt man aus (3), (5) und (6), daß $\beta(t)$ und $\gamma(t)$ Null sind; ist $n(t)$ mit t nur noch langsam veränderlich, so sind $\beta(t)$ und $\gamma(t)$ klein. In (10) kann man daher $\gamma(t)$ gegenüber n' vernachlässigen, es bleibt nur das $\beta(t)$ in der Gleichung stehen. (In B konnten wir $\gamma(t)$ mitnehmen und den Ausdruck $(\gamma(t) + n')$ exakt auf die logarithmische Ableitung der Stoßfrontgeschwindigkeit zurückführen. Das ist aber eine Feinheit, die nicht unbedingt erforderlich gewesen wäre.)

Die Größe $\beta(t)$ ist aber nun unmittelbar proportional zu dn/dt , so daß (10) unmittelbar einen Schluß auf das Vorzeichen von dn/dt erlaubt, wenn n noch nicht gleich n_0 ist, d. h. aber der Strömungstyp nicht ganz homolog ist. So konnte man in B schnell die Stabilität der ebenen Lösung $n = n_0$ erschließen.

Ersichtlich ist dieses einfache Vorgehen daran gebunden, daß wir in (2) $\alpha = 0$ setzen dürfen. In dem uns hier interessierenden GUDERLEY-Fall ist aber $\alpha = 2$, wir müssen also etwas anders vorgehen. Das Ziel bleibt das gleiche: Einen Ausdruck zu gewinnen, aus dem man das Vorzeichen von dn/dt ablesen kann.

In der GUDERLEYSchen Arbeit ist während des Einlaufens der kugeligen Stoßfront

$$t < 0; \quad dt > 0. \quad (11)$$

Im Hinblick auf unseren Ausdruck (6) soll bei uns gelten

$$t > 0; \quad dt < 0. \quad (12)$$

Gl. (1) ist am Punkte P_3 (GUDERLEY — Verfasser Nomenklatur) zu bilden.

Dann gilt, wenn fast homologe Verhältnisse vorliegen,

$$\nu \approx \nu_H = 0,66, \quad n \approx n_0 = 0,717. \quad (13)$$

Mit $\kappa = 1$ wird aus (1)

$$\beta(t) s + \gamma(t) 1,6 = \Re$$

oder, wenn wir (3) und (5) berücksichtigen

$$\frac{dn}{dt} \lambda s + \left(\frac{1}{n} - \frac{d\lambda}{dt} \right) 1,6 = \Re.$$

Unter Benutzung von (6) folgt

$$\left(\frac{1}{n} - \frac{d\lambda}{dt} \right) 1,6 = 1,6 n' \left(n \frac{\lambda}{t} - 1 \right) + 1,6 \lambda \frac{dn}{dt} \left(\frac{1}{n} + \ln t \right).$$

Damit erhält Gl. (1) bei uns die Form

$$\frac{dn}{dt} \lambda \left(s + 1,6 \left(\frac{1}{n} + \ln t \right) \right) + 1,6 n' \left(\frac{n\lambda}{t} - 1 \right) = \Re. \quad (14)$$

In Gl. (14) haben wir es mit drei kleinen Termen zu tun, wenn n gegen n_0 geht und dabei immer mehr konstant wird, nämlich:

$$dn/dt \quad (15), \quad \Re \quad (16), \quad n\lambda/t - 1. \quad (17)$$

Im ebenen Fall konkurrierten nur die Terme (15) und (16) untereinander, hier tritt der Term (17) hinzu. Das entspricht völlig dem mit α behafteten dritten Term der Hodographengleichung [s. B, I (15)]

$$du \pm \frac{dp}{\varrho a} \pm \alpha \frac{u a}{x} dt = 0.$$

Wir wollen (17) so umformen, daß die Größe dn/dt als Faktor auftritt. Dazu setzen wir

$$n\lambda/t - 1 = H/t^n. \quad (18)$$

Dann gilt für H die Gleichung

$$H = \int_0^t n(\tau) \tau^{n(\tau)-1} d\tau - t^n. \quad (19)$$

Differenzieren wir H und integrieren dann wieder, so folgt

$$-H = \int_0^t \frac{dn}{d\tau} \tau^n \ln \tau d\tau. \quad (20)$$

Zwar ist jetzt dn/dt noch nicht allgemeiner Faktor, aber doch bereits Faktor eines Integranden. Wir werden im folgenden (vorübergehend) setzen

$$n = n_0 + \varepsilon(t) \quad (21)$$

und ε als bereits klein gegenüber n_0 betrachten, so daß schon gelten soll

$$t^n \approx t^{n_0}. \quad (22)$$

Dann kann man (20) fortgesetzt partiell integrieren und erhält:

$$\begin{aligned} -\frac{H}{t^{n_0}} = & + \frac{1}{n_0+1} \frac{d\varepsilon}{dt} \left[\ln t - \frac{1}{n_0+1} \right] t \\ & - \frac{1}{(n_0+1)(n_0+2)} \frac{d^2\varepsilon}{dt^2} \left[\ln t - \frac{1}{n_0+1} - \frac{1}{n_0+2} \right] t^2 \\ & + \frac{1}{(n_0+1)(n_0+2)(n_0+3)} \frac{d^3\varepsilon}{dt^3} \\ & \cdot \left[\ln t - \frac{1}{n_0+1} - \frac{1}{n_0+2} - \frac{1}{n_0+3} \right] t^3 - + \dots \end{aligned} \quad (23)$$

zusammengefaßt

$$\begin{aligned} -\frac{H}{t^{n_0}} = & \sum_{\lambda=1}^{\sigma} \frac{t^{\lambda}}{\prod_{\nu=1}^{\sigma} (n_0+\nu)} \frac{d^{\lambda}\varepsilon}{dt^{\lambda}} \left[\ln t - \sum_{\nu=1}^{\lambda} \frac{1}{(n_0+\nu)} \right] \\ & + \frac{1}{\prod_{\nu=1}^{\sigma} (n_0+\nu)} \frac{1}{t^{n_0}} \int_0^t \frac{d^{\sigma}\varepsilon}{d\tau^{\sigma}} \left[\ln \tau - \sum_{\nu=1}^{\sigma} \frac{1}{(n_0+\nu)} \right] \cdot \tau^{n_0+2} d\tau. \end{aligned} \quad (23a)$$

Falls $t < 1$ ist (wir kommen noch auf diesen Punkt zurück) und die Funktion $\varepsilon(t)$, d. h. aber $n(t)$ genügend glatt ist, wird man in (23) damit auskommen, allein das erste Glied zu berücksichtigen.

Dann gilt

$$\frac{n\lambda}{t} - 1 \approx - \frac{1}{n_0+1} \frac{dn}{dt} \left[\ln t - \frac{1}{n_0+1} \right]. \quad (24)$$

Wir haben statt $d\varepsilon/dt$ wieder dn/dt geschrieben. Ebenso gilt jetzt

$$\lambda \approx t/n. \quad (25)$$

Mit (24) und (25) folgt aus (14)

$$\begin{aligned} \frac{dn}{dt} t \left[\frac{s}{n_0} + \frac{1,6}{n_0} \left(\frac{1}{n_0} + \ln t \right) - \frac{1,6(n')_0}{(n_0+1)} \ln t + \frac{1,6(n')_0}{(n_0+1)^2} \right] \\ = \frac{d\mathfrak{R}}{dn} (n - n_0), \end{aligned}$$

wobei wir die kleine Größe \mathfrak{R} an ihrer Nullstelle bei $n = n_0$ entwickelt haben. Wir kürzen ab

$$\frac{dn}{dt} \cdot t = \vartheta \cdot (n - n_0), \quad (26)$$

$$\vartheta = \frac{(d\mathfrak{R}/dn)_{n=n_0}}{\frac{s}{n_0} + \frac{1,6}{n_0^2} + \frac{1,6(n')_0}{(n_0+1)^2} + \left(\frac{1,6}{n_0} - \frac{1,6(n')_0}{n_0+1} \right) \ln t}. \quad (27)$$

Wenn wir uns nun noch über das Vorzeichen von (27) klar werden, haben wir in (26) einen Ausdruck, aus dem stabiles bzw. instabiles Verhalten abgelesen werden kann.

Wir wenden uns also der Gl. (27) zu.

Aus (13) und (7) folgt:

$$(n')_0 = -0,393. \quad (28)$$

s war mit (4) definiert. Entsprechend der Voraussetzung C in B und gemäß dem dort angeführten Gedankengang ersetzen wir die in s auftretenden Ableitungen $\partial v/\partial n$, $\partial \mu/\partial n$, $\partial \ln \varrho/\partial n$ durch die Ableitungen, die wir aus dem Richtungsfeld der Homologie-Lösungen für $\alpha = 2$ gewinnen können.

Dazu wurde der GUDERLEYSCH Lösungstyp für die Werte

$$n = 0,712 \quad \text{und} \quad n = 0,722$$

numerisch integriert. Es ergab sich:

$$\frac{\partial \ln \varrho_H}{\partial n} \approx -4,4, \quad \frac{\partial v_H}{\partial n} \approx -2,2, \quad \frac{\partial \mu_H}{\partial n} \approx -0,16. \quad (29)$$

Bilden wir nun die Größe s , so setzt sie sich genau wie in B aus Termen mit gleichen Vorzeichen zusammen. Wir erhalten

$$s \approx -4,9. \quad (30)$$

Die Größe $d\mathfrak{R}/dn$ erhalten wir, indem wir bilden:

$$\frac{d\mathfrak{R}}{dn} = \frac{\partial \mathfrak{R}}{\partial v} \frac{\partial v}{\partial n} + \frac{\partial \mathfrak{R}}{\partial n}.$$

Unter Verwendung von (2), (13), (28) und (29) erhalten wir:

$$d\mathfrak{R}/dn \approx -4,4. \quad (31)$$

Somit gilt

$$\vartheta = -4,4 / (-3,9 + 2,6 \ln t). \quad (32)$$

Beschränken wir uns jetzt auf den Fall $t < 1$, so werden alle im Nenner von (32) auftretenden Größen einerlei Vorzeichens und es gilt sicher

$$\vartheta > 0. \quad (33)$$

Wir diskutieren (26) unter Beachtung von (33). Ist $n > n_0$, so folgt aus (26)

$$dn/dt > 0.$$

Nun ist aber bei uns $dt < 0$ (s. 12), also gilt:

$$dn < 0.$$

Das heißt aber, daß n gegen n_0 strebt. Das Gleiche ergibt sich naturgemäß für $n > n_0$.

Auf ein Zentrum zulaufende noch nicht homologe Stoßwellentypen gehen also gegen die GUDERLEYSCH Lösung.

Wir machen uns klar, was für Voraussetzungen wir machen mußten.

1.

$$t < 1.$$

Die Größe t ist dimensionslos, bei jeder Anwendung auf irgend einen konkreten Fall muß man aus den Anfangsbedingungen einen Zeitmaßstab ermitteln. In diesem Maßstab ist dann $t < 1$ zu fordern, um zu einer Aussage kommen zu können. Geht man genügend nahe an den Kugelmittelpunkt heran, so ist die Forderung $t < 1$ immer zu befriedigen. Allgemein kann man also nur sagen, daß die Schlußweise in genügender Nähe zum Mittelpunkt erlaubt ist. Ist $t > 1$, so kann man aus (32) nicht etwa auf Instabilität schließen, denn dann kann man nicht so ohne weiteres in (23) nach dem ersten Gliede abbrechen. Man kann dann auf so einfache Art und Weise zu gar keinem Schluß kommen. In ähnlicher Weise beschränkte GUDERLEY seine Lösung auf die Nähe zum Kugelmittelpunkt. Diesen Zug finden wir bei der Untersuchung der Stabilität der ebenen Lösung nicht (Arbeit B), was nur natürlich ist, denn dort gibt es keinen ausgezeichneten Weltpunkt (x, t)

(in der Hodographengleichung kommt durch das Glied mit α eben die Zeit hinein und Gl. (1) ist ja die Hodographengleichung am Punkt P_3).

2. Wir mußten genügende Glattheit der Funktion $n(t)$ fordern, um in (23) nach dem ersten Gliede abbrechen zu können.

Außer diesen beiden Voraussetzungen gelten natürlich die Voraussetzungen A, B und C, ohne die die Methode der verbotenen Umkehranten nicht anwendbar ist. —

Es versteht sich von selbst, daß die gleichen Überlegungen auf den Fall $\alpha = 1$ anwendbar sind.

Herrn Prof. v. WEIZSÄCKER, Göttingen, und Herrn Prof. FRIEDRICH, New York, danke ich sehr für die Anregung zu dieser Arbeit und viele hilfreiche Diskussionen, die häufig auf den Arbeitskreis um Prof. v. WEIZSÄCKER erweitert wurden. Herrn Prof. BIERMANN danke ich für die Möglichkeit, die Göttinger elektronische Rechenmaschine G 1 benutzen zu dürfen.

Bemerkungen zur Berechnung von Molekülintegralen bei kleinem Kernabstand II

Von W. BINGEL

Aus der Forschungsstelle für Spektroskopie in der Max-Planck-Gesellschaft, Hechingen

(Z. Naturforschg. **11 a**, 186—192 [1956]; eingegangen am 22. Dezember 1955)

Die in einer früheren Arbeit¹ gegebene Darstellung der Übergangintegrale $K_{\alpha\beta}$ durch die Hilfsfunktionen $C_n(\varrho)$ wird auf den Fall erweitert, daß das Atom b nicht auf der Polarachse der Einelektronenfunktionen ψ_a des Atoms a liegt. Die hier gegebene Darstellung gestattet es, Summen von Integralen dieser Art über die Außenatome B eines mehratomigen Moleküls oder Komplexions vom Typ AB_p einfach zu berechnen.

Alle quantenmechanischen Berechnungen der Elektronenstruktur von Atomen, Molekülen und Kristallen erfordern zu ihrer numerischen Durchführung die Kenntnis einer Anzahl von Integralen (COULOMB-, Austausch-, Übergangintegrale usw.). Diese über den gesamten Raum erstreckten Integrale sind Funktionen der effektiven Kernladungen der verwendeten Einelektronenfunktionen ψ_a (AO's = atomic orbitals) und außerdem — bei den Molekülen und Kristallgittern — der Kernkoordinaten. Eines dieser Integrale ist das *Übergangsintegral* (nuclear attraction integral)

$$K_{\alpha\beta}(R) = \int \frac{a_\alpha(1) \cdot a_\beta(1)}{r_{1b}} d\tau_1 \quad (1)$$

(in atomaren Einheiten),

das die potentielle Energie der Ladungsverteilung $a_\alpha(1) \cdot a_\beta(1)$ um das Atom a im COULOMB-Feld einer Punktladung beim Atom b darstellt. Dabei ist R der Abstand der Atome a und b, r_{1b} der Abstand des Integrationspunktes 1 vom Atom b. a_α und a_β sind AO's des Atoms a, wo der Index die verschiedenen möglichen Werte der Quantenzahlen n, l, m kennzeichnet.

Für die Einelektronenfunktionen ψ_a wird fast ausschließlich eine spezielle, von SLATER eingeführte Funktionenfamilie benutzt (SLATER-AO's)². Die Übergangintegrale (1) werden im allgemeinen durch Einführen elliptischer Koordinaten ξ, η mit den Zentren in a und b ausgewertet. Sie lassen sich dann durch gewisse Hilfsfunktionen $A_n(\varrho)$ darstel-

¹ W. BINGEL, Z. Naturforschg. **11 a**, 85 [1956]; im folgenden mit I bezeichnet.

² Für eine Zusammenstellung der SLATER-AO's und ihrer Eigenschaften siehe z. B. W. BINGEL, Z. Naturforschg. **9 a**, 675 [1954].