

А. П. КАЛИНИН, В. Б. ЛЕОНАС

**ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ  
АТОМОВ БЛАГОРОДНЫХ ГАЗОВ С МОЛЕКУЛОЙ CO<sub>2</sub>**

(Представлено академиком Г. И. Петровым 4 VIII 1970)

Интерес к изучению атомно-молекулярных короткодействующих сил взаимодействия связан с проблемой количественного описания процессов релаксации молекулярных степеней свободы в газовых смесях. Последние, в свою очередь, в значительной степени определяют эффективность молекулярных газовых лазеров.

В настоящей работе, используя метод рассеяния быстрых нейтральных пучков, подробно описанный в (1), измерены зависимости от энергии интегральных сечений рассеяния атомов благородных газов в углекислом газе. По этим данным восстановлены межатомные, а по ним усредненные (сферически симметричные) потенциалы взаимодействия на малых расстояниях сближения. Измеренные в эксперименте интегральные сечения рассеяния  $Q(E)$  определялись по ослаблению  $\Delta I$  начальной интенсивности пучка  $I_0$ , прошедшего в митени с плотностью  $n$  путь длиной  $l$ .

$$Q(E) = \Delta I / I_0 n l. \quad (1)$$

На рис. 1 прямые соответствуют экспериментальным значениям с максимальной ошибкой 1%. С другой стороны, эта величина очевидным образом может быть связана с зависящим от ориентации дифференциальным сечением рассеяния  $\sigma(\theta, \gamma, E)$  (или  $bdb$  в классическом описании, где  $b$  — прицельный параметр),  $\gamma$  — угол относительной ориентации молекулы и атома:

$$Q(E) = \pi \int_0^\pi \int_0^\pi \sigma(\theta, \gamma, E) (1 - f_0(\theta)) \sin \theta \sin \gamma d\theta d\gamma = \\ = \pi \int_0^\infty db \int_0^\pi b(\theta, \gamma, E) (1 - f_0(\theta)) \sin \gamma d\gamma, \quad (2)$$

где  $1 - f_0(\theta)$  — аппаратная функция, подробно рассмотренная в (2) и учитывающая эффективность регистрации выбывания из пучка частицы, рассеянной на угол  $\theta$ .

Из сопоставления соотношений (1) и (2) видно, что для интерпретации измерений необходимо, задаваясь разумным видом параметрической зависимости  $\sigma(\theta, \gamma, E)$ , вычислить  $Q(E)$  по (2), а значения параметров определить из условия равенства измеренных и вычисленных значений  $Q(E)$ . Единственными параметрами, входящими в зависимость  $\sigma(\theta, \gamma, E)$ ,

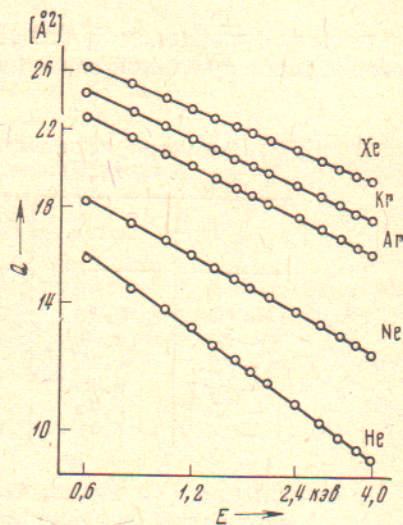


Рис. 1

являются параметры потенциала межатомного взаимодействия, выбиравшегося нами в виде  $V = A \exp(-\alpha R)$ . При этом поверхность потенциальной энергии атомно-молекулярного взаимодействия  $u(R, r_e)$ , принималась соответствующей модели аддитивных вкладов межатомных потенциалов, т. е.

$$u(R, r_e) = \sum_{j=1}^3 V(r_j).$$

Здесь  $R$  — расстояние между центром тяжести молекулы  $\text{CO}_2$  и атомом благородного газа,  $r_e$  — равновесное межатомное расстояние в молекуле  $\text{CO}_2$  ( $r_e = 1,162 \text{ \AA}$ ),  $r_j$  — расстояние между атомом благородного газа и атомом  $j$  молекулы  $\text{CO}_2$  (в дальнейшем мы принимаем их одинаковыми; физически это оправдано наличием единой электронной оболочки).  $u(R, r_e)$ , очевидно, зависит от угла относительной ориентации  $\gamma$ , и полезно ввести межмолекулярный потенциал  $\bar{u}(R, r_e)$  усредненный по углам:

$$\bar{u}(R, r_e) = \frac{1}{2} \int_0^\pi u(R, r_e) \sin \gamma d\gamma.$$

Усредненный потенциал  $\bar{u}(R, r_e)$ , как оказалось, довольно хорошо описывается экспоненциальной зависимостью.

Таблица 1

Параметры межатомных и усредненных потенциалов взаимодействия молекулы  $\text{CO}_2$  с атомами

|      | $\alpha, \text{ \AA}^{-1}$ | $A, \text{ эв}$   | $\bar{\alpha}, \text{ \AA}^{-1}$ | $\bar{A}, \text{ эв}$ |
|------|----------------------------|-------------------|----------------------------------|-----------------------|
| — He | 3,72                       | $0,49 \cdot 10^3$ | 3,38                             | $0,98 \cdot 10^3$     |
| — Ne | 4,50                       | $1,49 \cdot 10^3$ | 4,23                             | $17,4 \cdot 10^3$     |
| — Ar | 4,82                       | $8,7 \cdot 10^3$  | 4,55                             | $13,3 \cdot 10^4$     |
| — Kr | 4,93                       | $1,58 \cdot 10^4$ | 4,67                             | $26,7 \cdot 10^4$     |
| — Xe | 5,05                       | $3,67 \cdot 10^4$ | 4,78                             | $68 \cdot 10^4$       |
| — O  | 4,01                       | $0,95 \cdot 10^3$ | 3,63                             | $5,58 \cdot 10^3$     |

Из выражения (2) видно, что для вычисления  $Q(E)$  необходимо для данного  $b$  найти угол отклонения  $\theta(\gamma)$ . В приближении малых углов рассеяния ( $\theta \ll 1$ )<sup>(3)</sup>, хорошо оправданном в данных измерениях, угол отклонения  $\theta = \Delta p / p$ , где  $\Delta p$  — поперечный, а  $p$  — продольный импульс, определяемый известной относительной скоростью. Таким образом, для нахождения  $\theta(\gamma)$  необходимо вычислить  $\Delta p(\gamma)$ . Последний находился по методу, предложенному Б. М. Смирновым и сводящемуся к следующему. На плоскость, нормальную к вектору относительной скорости, проектируются молекула и атом; тогда расстояния между проекциями атомов на этой плоскости окажутся прицельными расстояниями для рассеяния налетающего атома каждым атомом молекулы  $\text{CO}_2$ . Эти прицельные расстояния можно связать с  $r_e$  и прицельным расстоянием, соответствующим движению относительно центра тяжести молекулы. Векторная сумма импульсов, полученных атомами при взаимодействии с атомами молекулы  $\text{CO}_2$ , позволяет определить угол отклонения для заданной относительной ориентации взаимодействующих частиц.

Заметим, что в этом рассмотрении угол  $\gamma$  заменяется углами  $\varphi, \chi$ , дающими ориентацию молекулы (или двух молекул) относительно выбранной плоскости ( $\theta = \theta(b, \varphi, \chi)$ ).

Вычисление  $Q(E) = 2 \int_0^\infty \int_{-1}^{+1} b db (1 - f_0(\theta)) d \cos \chi d\varphi$ , учитывая зависимость подынтегральной функции от  $\varphi$  и  $\chi$ , проводилось по методу Монте-

Карло; варьируя параметры межатомного потенциала  $A$  и  $a$ , вычисленная зависимость  $Q(E)$  совмещалась с измеренной. На рис. 1 точками показаны рассчитанные значения. Полученные таким образом значения  $A$  и  $a$  представлены в табл. 1, куда также включена исследованная ранее система  $O - CO_2$  (<sup>4</sup>). Точность вычисления  $Q(E)$  принималась равной 3% (что несколько хуже относительной точности измерений 1—1,5%), а  $b$  варьировались в пределах от  $r_e$  до  $4r_e$  (верхний предел определялся по условию малого ( $< 3\%$ ) влияния на вычисленные значения  $Q(E)$ ). Параметры  $A$  и  $\bar{a}$  усредненного потенциала также представлены в табл. 1. Область применимости значений параметров табл. 1 находится в упомянутом выше диапазоне расстояний.

Надо отметить, что значения  $\bar{u}(R, r_e)$  примерно вдвое превышают значения потенциальных энергий, находимых в приближении сферической симметрии молекулы  $CO_2$  по наклону зависимости  $\ln Q$  от  $\ln E$  стандартным путем (<sup>1</sup>). Представляется интересным также отметить обратную ожидаемой по данным о колебательной релаксации (см., например (<sup>5</sup>)) последовательность значений  $a$  для ряда атомов благородных газов. Это обстоятельство является дополнительным свидетельством грубости используемых в теории ударного возбуждения колебаний приближений.

В заключение авторы выражают глубокую благодарность Б. М. Смирнову и Ю. Г. Маламе за полезные обсуждения и помощь в составлении расчетной программы.

Институт космических исследований  
Академии наук СССР  
Москва

Поступило  
29 VII 1970

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- <sup>1</sup> Ю. Н. Беляев, В. Б. Леонас, А. В. Сермягин, V Intern. Conf. Phys. Electr. Atom. Collision, 1967, p. 643. <sup>2</sup> А. П. Калинин, В. Б. Леонас, А. В. Сермягин, Вестн. Московск. ун-в., № 3 (1971). <sup>3</sup> Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Механика, М., 1958. <sup>4</sup> Yu. N. Belyaev, N. V. Kamuyshov et al., Entropie, 30, 144 (1969). <sup>5</sup> С. В. Moore, J. Chem. Phys., 52, 1453 (1970).