

А. П. КАЛИНИН, В. Б. ЛЕОНАС

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛОВ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ОБЛАСТИ МАЛЫХ РАССТОЯНИЙ ДЛЯ CO₂, N₂O ПО ДАННЫМ УПРУГОГО РАССЕЯНИЯ ПУЧКОВ

(Представлено академиком Г. И. Петровым 27 I 1971)

Развитие газовых молекулярных лазеров и прямые исследования планетных атмосфер стимулировали в последние годы интерес к свойствам газовых смесей, включающих молекулы CO₂, N₂O и их осколки.

При количественном описании элементарных процессов, сопровождающих столкновения в таких газовых системах, одной из ключевых характеристик является межмолекулярный потенциал взаимодействия для различных пар частиц.

Потенциалы взаимодействия упомянутых выше систем являются анизотропными, так как силы взаимодействия зависят от ориентации. Известен ряд геометрических моделей описания несферического силового поля (¹), однако здесь выбрана более адекватная модель нецентрального поля в виде суммы вкладов силовых центров, помещенных в точках расположения атомов молекулы и принимаемых тождественными.

В настоящей работе, используя метод упругого рассеяния (²), измерения зависимости интегральных сечений рассеяния Q от энергии, а по ним найдены параметры анизотропного межмолекулярного потенциала для пар N₂O — N₂O, N₂, He, Ne, Ar, Kr, Xe. Кроме того приводятся параметры анизотропного потенциала взаимодействия для систем CO₂ — CO₂, N₂, O₂, CO, полученные из измерений (³).

Для исследованных систем аддитивный потенциал характеризуется межатомным отталкиванием, для которого принята экспоненциальная зависимость от межатомного расстояния ($V = A \exp(-ar)$).

Измеряемой в эксперименте величиной является ослабление ΔI интенсивности I_0 пучка при прохождении однородной мишени с плотностью n и длиной l , которое в случае малости ΔI можно связать с интегральным сечением $Q(E)$ соотношением

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

По аналогии с определением полного сечения рассеяния можно далее записать

$$Q(E) = 2\pi \int_{-1}^{+1} \sigma(\theta, E) (1 - f_0(\theta)) d \cos \theta = 2\pi \int_0^\infty b(\theta) (1 - f_0(\theta)) db, \quad (2)$$

где $f_0(\theta)$ — аппаратная функция, аналогичная использованной в (⁴) и дающая эффективность регистрации детектором частиц, отклоненных на угол θ .

Из выражения (2) видно, что для решения обратной задачи, т. е. вычисления измеряемого $Q(E)$, необходимо располагать функцией отклонения $\theta(b)$, которая для нецентрального силового поля является функцией углов относительной ориентации, т. е. $\theta(b) = \theta(b, E, \varphi_i, \chi_i)$. Таким образом в случае двух молекул легко прийти к выражению

$$Q(E) = \frac{1}{8\pi} \int_b db \iint_{(\varphi)} d^2 \varphi_i \iint_{(\chi)} b(\theta, E, \varphi_i, \chi_i) (1 - f_0(\theta)) d^2 \cos \chi_i. \quad (3)$$

В выражении (3) φ_i и χ_i — углы, описывающие ориентацию осесимметричной молекулы относительно плоскости xu , выбираемой перпендикулярно вектору относительной скорости сталкивающихся частиц.

Вычисление $\theta(b, \varphi_i, \chi_i, E)$ для фиксированного набора значений b, φ_i, χ_i оказывается достаточно простым для рассеяния на малые углы ($\theta \ll 1$, $V/E \ll 1$), которое реализуется в описанном эксперименте. В этом случае, используя известный результат ⁽⁵⁾, вычисление сводится к нахождению модуля вектора поперечного (т. е. в плоскости xu) импульса, равного сумме (аддитивность потенциала) импульсов по всем парам атомов взаимодействующих молекул. В случае экспоненциального межатомного потенциала для $\theta(b, \varphi_i, \chi_i, E)$ получается простое аналитическое выражение, хорошо описывающее рассеяние в диапазоне расстояний сближения между центрами тяжести молекул от 3 до $8a_0$.

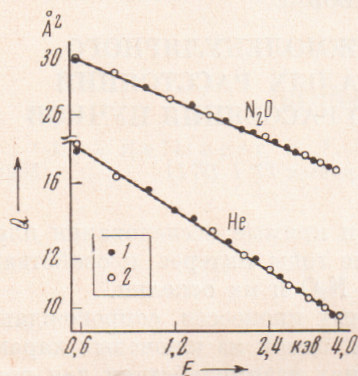


Рис. 1

С помощью этого выражения пятикратный интеграл (3) вычислялся методом Монте-Карло при принятой статистической ошибке в 1%. Совпадение измеренных и вычисленных для различных значений A и

α зависимостей $Q(E)$ приводит к определению (однозначному) параметров межатомного потенциала. На рис. 1 показаны типичные примеры согласия вычисленных (1) и измеренных (2) значений для систем $N_2O - N_2O$ и $N_2O - He$. Полученные описанным методом значения A и α и параметры $\bar{A}, \bar{\alpha}$ экспоненциальной аппроксимации усредненного (сферически симметричного) межмолекулярного потенциала приводятся в табл. 1. Область применимости приведенных значений простирается от 0,1 до 10 эв.

Таблица 1

Параметры межатомных (α, A) и усредненных межмолекулярных потенциалов ($\bar{\alpha}, \bar{A}$)

Система	$\alpha, \text{\AA}^{-1}$	$A \cdot 10^{-3}, \text{эв}$	$\bar{\alpha}, \text{\AA}^{-1}$	$\bar{A} \cdot 10^{-3}, \text{эв}$
$CO_2 - CO_2$	3,97	1,09	3,43	44,90
$CO - CO_2$	3,82	0,90	3,55	19,22
$O_2 - CO_2$	3,59	0,49	3,33	8,72
$N_2 - CO_2$	4,06	1,17	3,78	30,0
$N_2O - N_2O$	3,53	0,41	3,07	10,76
$N_2 - N_2O$	3,50	0,43	3,25	6,77
$He - N_2O$	4,02	6,80	3,85	68,33
$Kr - N_2O$	3,78	2,58	3,63	22,52
$Ar - N_2O$	3,70	1,47	3,53	11,42
$Ne - N_2O$	3,93	0,84	3,63	5,68
$He - N_2O$	3,19	0,12	2,98	0,55

Результаты настоящей работы позволяют сделать следующие выводы:

1) Построена эмпирическая (по данным упругого рассеяния) поверхность потенциальной энергии взаимодействия молекул в области малых расстояний.

2) Значения A и α (табл. 1) дают возможность надежно вычислять релаксационные характеристики газовых систем, включающих молекулы N_2O, CO_2 .

3) Данные таблицы позволяют вычислять коэффициенты переноса для частично диссоциированных CO_2 -атмосфер планет при температурах $\geq 10^3$ K.

4) В области рассматриваемых расстояний сближения понятие изоэлектронности молекул CO_2 и N_2O (см. также ⁽⁶⁾) нельзя распространять на межмолекулярное взаимодействие.

5) Ход изменения значений параметра α в ряду благородный газ — N_2O указывает на отсутствие в исследованном диапазоне расстояний сближения простой связи этого параметра с потенциалом ионизации атомной системы.

Авторы выражают глубокую благодарность Б. М. Смирнову за полезные обсуждения и предложение использованного в работе приема нахождения функции отклонения.

Институт космических исследований
Академии наук СССР
Москва

Поступило
21 I 1971

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ Дж. Гиршфельдер, Ч. Кертисс, Р. Берд, Молекулярная теория газов и жидкостей, ИЛ, 1961. ² А. Б. Камнев, В. Б. Леонас, В. Г. Попов, Приборы и техн. эксп., № 2, 182 (1966). ³ Ю. Н. Беляев, Н. В. Камышов, В. Б. Леонас, А. В. Сермягин, Entropie, № 30, 137 (1969). ⁴ В. Б. Леонас, А. В. Сермягин, Письма ЖЭТФ, 12, № 9, 432 (1970). ⁵ Л. Ландау, Е. Лифшиц, Механика, М., 1958. ⁶ А. П. Калинин, В. Б. Леонас, ДАН, 197, № 2 (1971).