

Оценка вклада в сечение прямолинейных траекторий показала, что он не существен. Вычисления также проводились для пенинговской ионизации

$$\sigma = 2\pi \left(\frac{Z}{v}\right)^2 \frac{1}{v} + 2\pi \int_{\rho_0}^{\infty} \left(1 - \sum_{n=1}^4 |C_n(+\infty)|^2\right) \rho d\rho \quad (3)$$

представлены в табл. 2.

Таблица 2

| | $\sigma, 10^{-16} \text{ см}^2$ | | | | | |
|----|---------------------------------|------|------|------|------|------|
| | 0.5 | 1 | 2 | 5 | 10 | 30 |
| He | 11.0 | 7.83 | 6.21 | 4.13 | 3.86 | 3.5 |
| Ne | 15.84 | 12.5 | 9.18 | 6.75 | 5.4 | 3.90 |
| Ar | 29.2 | 20.6 | 15.1 | 9.80 | 7.15 | 5.05 |
| Kr | 35.5 | 25.4 | 18 | 11.4 | 8.0 | 4.68 |
| Xe | 44.6 | 31.8 | 22.6 | 14.2 | 10.1 | 5.82 |

По мере перехода от легких атомов инертных газов к тяжелым вклад в сечение области обитования увеличивается по сравнению с областью прямолинейных траекторий. Это связано с увеличением поляризуемости атомов инертных газов и уменьшением сечения фотоионизации.

В области рассматриваемых энергий сечения пенинговской ионизации для Kr и Xe полностью определяются захватом на орбиту.

Литература

- [1] В. А. Квливидзе, П. А. Свотин. Опт. и спектр., 37, в. 1, 1974.
 [2] R. J. Bell, A. E. Kingston. Proc. Phys. Soc., 88, 901, 1961.
 [3] Б. М. Смирнов. Атомные столкновения и элементарные процессы в плазме. Атомиздат, 1968.

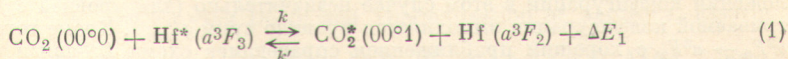
Поступило в Редакцию 10 июля 1973 г.

УДК 539.186

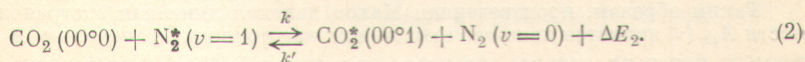
О КВАЗИРЕЗОНАНСНОЙ ПЕРЕДАЧЕ ЭНЕРГИИ ВОЗБУЖДЕНИЯ В СИСТЕМЕ $\text{CO}_2\text{—Nf}$

П. Ф. Груздев и Н. Г. Преображенский

Недавно Мах [1] обратил внимание на то, что вследствие малой разности энергий, соответствующих состоянию a^3F_3 атома гафния и продольному антисимметричному типу колебаний ($00^0 1$) молекулы CO_2 , возникает новая интересная возможность создания инверсной заселенности и осуществления генерации на колебательно-вращательных переходах $00^0 1\text{—}10^0 0$ и $00^0 1\text{—}02^0 0$. Более того оцененная Махом константа скорости реакции



составила величину $k=8.7 \cdot 10^{-11} \text{ см}^2 \cdot \text{сек}^{-1}$, что на два порядка превышает аналогичную константу скорости [2, 3] широко используемой реакции



При этом $\Delta E_1=7.3 \text{ см}^{-1}$, а $\Delta E_2=18.0 \text{ см}^{-1}$ и столь разительное отличие в скоростях передачи энергии возбуждения обязано, по мнению Маха, главным образом тому, что ход реакции (2) в значительной степени определяется диполь-квадрупольным характером взаимодействия сталкивающихся партнеров [4], в то время как в случае (1) необходим учет лишь диполь-дипольного взаимодействия.

Эти оптимистические выводы работы [1] нуждаются, однако, в существенных коррективах, произвести которые и является целью настоящей заметки.

Если, как и в оценках [1, 4] оставаться в рамках модели твердых сфер, то для константы скорости реакции (1) следует записать выражение [5]

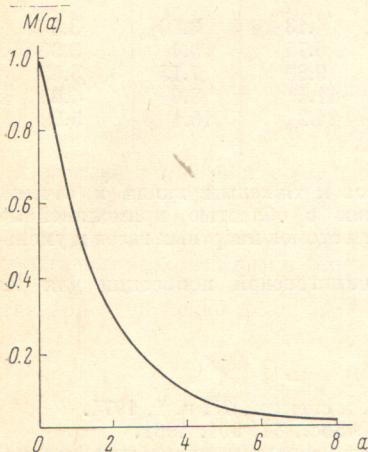
$$k = \frac{2\pi}{\hbar^2} \int_0^\infty \int_0^\infty b v f(v) \left| \int_{-\infty}^{+\infty} U(t) e^{i\omega t} dt \right|^2 db dv, \quad (3)$$

где b — прицельный параметр, $f(v)$ — функция распределения рассматриваемых частиц по скоростям, ω — частота перехода и

$$U(t) = \mu_1 \mu_2 r^{-3}(t) \quad (4)$$

потенциал диполь-дипольного взаимодействия. Несложные преобразования позволяют переписать (3) в виде

$$k = \frac{3\lambda^3 \mu_1^2 \mu_2^2}{4\pi^2 \hbar} A_{\text{Hf}} \mathcal{J}. \quad (5)$$



В этом выражении величину дипольного момента перехода между состояниями (00^00) и (00^01) молекулы CO_2 можно считать установленной достаточно надежно [3, 4]. $\mu_1^2 = 1.0 \times 10^{-37}$ эрг · см². Что же касается перехода $a^3F_3 \rightarrow a^3F_2$ в спектре атома гафния, то соответствующую вероятность A_{Hf} , определяющую значение дипольного момента μ_2 (λ — длина волны этого перехода), Мах попытался ориентировочно оценить только на основании линейной экстраполяции частотной зависимости некоторого набора приближенно найденных величин A_{ik} для других известных разрешенных переходов Hf. Последний множитель в (5) имеет вид

$$\mathcal{J} = \eta \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{f(v)}{b^3 v} M(a) db dv, \quad (6)$$

где

$$M(a) = \left| \int_0^\infty \frac{e^{iax} dx}{(1+x^2)^{3/2}} \right|, \quad (7)$$

$a = \omega b/v$ и коэффициент η представляет собой легко находимую поправку на неравномерную (больцмановскую) заселенность вращательных состояний. Результат машинного расчета функции $M(a)$ приведен на рисунке.

Как видно из выражения (5), наибольшего внимания в данной задаче заслуживают два фактора: уже упомянутая вероятность перехода A_{Hf} и интеграл \mathcal{J} , величина которого будет в существенной степени зависеть от функции $f(v)$, в общем случае заметно отличающейся от равновесной [6].

Рассмотрим вкратце первый фактор. Основной вклад в величину вероятности перехода $a^3F_3 \rightarrow a^3F_2$ в спектре атома Hf дает магнитное дипольное излучение. Вероятность магнитно-дипольного перехода $a^3F_3 \rightarrow a^3F_2$ атома гафния можно определить достаточно надежно. Анализ имеющихся экспериментальных данных по множителям g уровней с $j=3$ и $j=2$ конфигурации $5d^2 5s^2$ атома Hf [7] показывает, что влияние наложения конфигураций в этом случае незначительно (для уровней с $j=2, 3$ рассматриваемой конфигурации выполняется правило сумм $g_{\text{векп.}}$). Кроме того, для перехода $a^3F_3 \rightarrow a^3F_2$ с хорошим приближением справедлива схема LS -связи (состояние a^3F_3 не зависит от типа связи, а для наиболее глубокого уровня a^3F_2 атома Hf отступление от LS -связи мало). Расчет вероятности магнитно-дипольного перехода $a^3F_3 \rightarrow a^3F_2$ при LS -связи дает значение $A_{\text{Hf}} = 0.26$ сек.⁻¹

Таким образом, произведенная Махом далекая линейная экстраполяция зависимости $A_{ik}(v)$ является явно неоправданной: она приводит к значению A_{Hf} рассматриваемого перехода, которое завышено примерно в 200 раз по сравнению с результатом прямого расчета.

Обсудим теперь процедуру вычисления интеграла \mathcal{J} , трактуемого как линейный функционал $\mathcal{J}(f)$. Ранее [8] одним из авторов уже обсуждалась возможность распространения на соответствующий класс неравновесных задач метода решения уравнения Больцмана, приведенного преобразованием Гильберта к виду

$$\frac{Df}{Dt} = \iiint G(v, v') f(v') d^3 v' - H(v) f(v). \quad (8)$$

Указанный метод имеет свое начало еще от исследований Ферми и Вигнера [9, 10] по теории термализации и рассеяния нейтронов. В данном случае структура ядра G и множителя N определяется постулируемым законом рассеяния и видом функции распределения частиц, рассматриваемых как основной компонент квазибинарной системы (атомы ^{235}U и молекулы CO_2 в невозбужденном состоянии). Главное преимущество используемого метода состоит в избавлении от необходимости разложений по малому параметру (тока Чепмена—Энскога), которые теряют эффективность при описании сильно неравновесных систем.

После интегрирования по телесному углу, соответствующему вектору v' и переходу к модулю скорости v , задача сводится к решению обыкновенного дифференциального уравнения

$$\frac{d^2g}{dx^2} + \alpha(x) \frac{dg}{dx} + \beta(x)g = 0, \quad (9)$$

в котором x — безразмерная скорость, а $\alpha(x)$ и $\beta(x)$ — некоторые полиномы, находящиеся полуэмпирически — путем привязки к характерным данным по кинетике современных электроразрядных CO_2 -лазеров [3, 11, 12]. Искомая функция распределения определяется соотношением

$$f(v) = \int \frac{1}{v_0} g(v_0) f_0(v, v_0) dv_0, \quad (10)$$

причем f_0 — ее исходное неравновесное выражение [12]. Окончательное вычисление многократного интеграла (6) производится с помощью процедуры Монте—Карло; уравнение (9) легко решается методом Рунге—Кутты.

Результаты выполненной нами серии расчетов функционала $\mathcal{J}(f)$ позволяют сделать следующий вывод: если подставить в (6) равновесную (максвеллову) функцию $f(v)$ и найти соответствующий ей интеграл \mathcal{J}_{max} , то отношение $\mathcal{J}/\mathcal{J}_{\text{max}}$ в некоторых случаях, представляющих реальный интерес [10], может достигать примерно до 4÷5. Мах в [1] исходил из максвеллова распределения $f(v)$. Следовательно, в наиболее благоприятных ситуациях можно рассчитывать на значение константы скорости реакции (1)

$$k = 2 \cdot 10^{-12} \text{ см}^3 \cdot \text{сек}^{-1} = 6.5 \cdot 10^4 \text{ сек}^{-1} \cdot \text{тор}^{-1},$$

что в 40÷50 раз меньше величины, приводимой в [1]. Это означает, что процесс квазирезонансной передачи энергии возбуждения от атомов гафния к молекулам CO_2 все же нужно считать достаточно эффективным и заслуживающим экспериментального изучения.

Авторы благодарят В. В. Пикалова за помощь в расчетах.

Литература

- [1] H. Mach. Phys. Lett., 39A, 431, 1972.
- [2] C. B. Moore, R. E. Wood, Bei-Lok Hu, J. T. Yardley. J. Chem. Phys., 46, 4222, 1966.
- [3] R. L. Taylor, S. J. Bitterman. J. Chem. Phys., 50, 1720, 1969.
- [4] R. D. Sharma, C. A. Brau. Phys. Lett., 19, 1273, 1967.
- [5] Дж. Гиршфельдер, Ч. Кертис, Р. Берд. Молекулярная теория газов и жидкостей. ИЛ, М., 1961.
- [6] Comprehensive Chemical Kinetics. Ed. C. H. Bamford, C. F. H. Tipper, vol. 1-3, Elsevier, Amsterdam—London—New York.
- [7] Ch. E. Moore. Atomic Energy Levels. vol. 3, Nat. Bur. Stand, 1958.
- [8] Н. П. Преображенский. Сб. «Аэрофизические исследования», вып. 2. Изд. СО АН СССР, Новосибирск, 1973.
- [9] E. Fermi. In «Collected Papers of Enrico Fermi», 803. Univ. of Chicago Press, Chicago, Ill., 1962.
- [10] M. Williams. The Slowing Down and Thermalisation of Neutrons. Elsevier, New York, 1966.
- [11] R. Bullis, W. Nighan, M. Fowler, W. Wiegand. AIAA Journal, 10, 407, 1972.
- [12] E. Whipple. Phys. Fluids, 15, 988, 1972.

Поступило в Редакцию 15 августа 1973 г.