

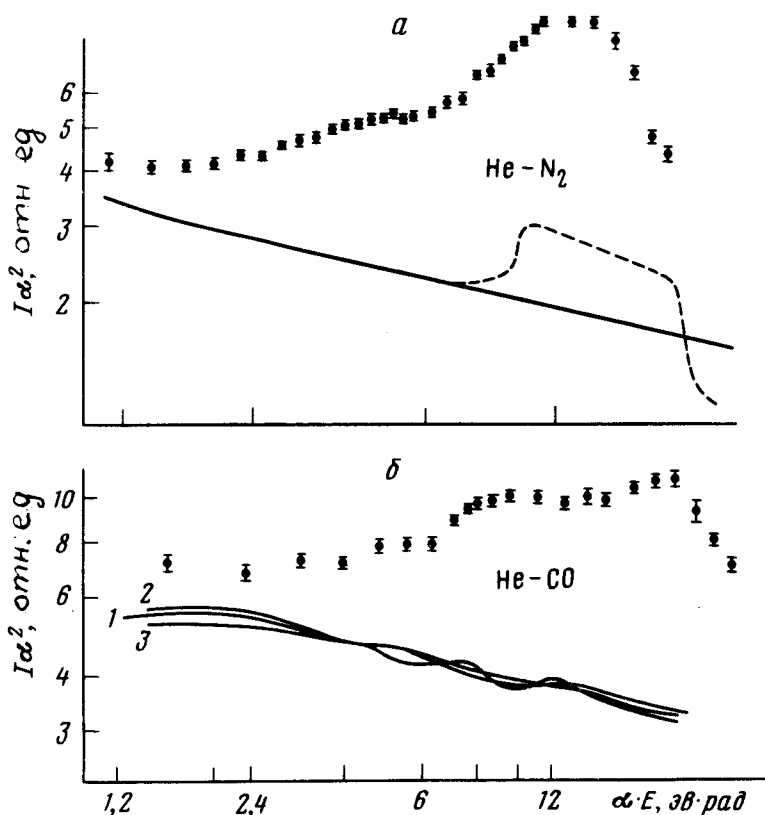
ИЗУЧЕНИЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО РАССЕЯНИЯ АТОМОВ He В CO И N₂

А.П. Калинин, В.Б. Леонас, В.Н. Хромов

Представлены результаты измерения дифференциального рассеяния атомов He в CO и N₂ в интервале углов детектора $(0 \div 5) \cdot 10^{-2}$ рад и энергии пучка He $E = 800$ эв. Проведено сравнение и обнаружено различие экспериментальной картины рассеяния с зависимостью, рассчитанной для теоретических поверхностей потенциальной энергии для обеих систем.

В последние годы резко возрос интерес к эффектам молекулярных столкновений, определяющих заселение вращательно-колебательных уров-

ней молекул. В связи с трудностью прямых измерений сечений определенных молекулярных переходов наибольшие надежды на получение необходимой информации связывают с использованием теории рассеяния, позволяющей решать динамическую задачу столкновения при известном потенциале взаимодействия. Тем самым определение анизотропных межмолекулярных сил становится ключом к решению возникающих задач.



В настоящей работе представлены результаты измерений дифференциального упругого рассеяния (ДР) изоэлектронных пар He-N₂, He-CO; основной целью работы являлось сравнение экспериментальных кривых ДР с зависимостями, рассчитанными для предложенных в [1, 2] теоретических поверхностей потенциальной энергии (ППЭ). Такое сравнение позволяет оценить надежность предсказаний [1, 2] на основе популярной так называемой статистической модели (СМ), установить возможность эмпирической корреляции приближений СМ. Полученные данные позволяют также независимо найти параметры модельного потенциала, например, аддитивного типа.

Установка и метод автоматизированных измерений ДР быстрых пучков подробно описаны в [3, 4]. Измерения проводились в интервале углов детектора α от 0 до $5 \cdot 10^{-2}$ рад и энергии пучка He $E = 800$ эв. Результаты измерений интенсивности рассеянного пучка I (а) показаны на рисунке в приведенных координатах $I\alpha^2$ и αE ; вертикальными штрихами показана средняя квадратичная ошибка отдельных измерений. Полученные картины ДР значительно отличаются от ожидаемых

для взаимодействия, описываемого обычными экспоненциальными или степенными потенциалами.

Расчет картины рассеяния в классическом приближении основан на использовании простого соотношения для свертки дифференциального сечения $\sigma(\theta) = \frac{b}{\sin \theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right|$.

$$I(\alpha) = C \int_{\langle \Omega \rangle} \int_{\langle b \rangle} f_{\alpha}(\theta) b db d\Omega, \quad (1)$$

где b — прицельное расстояние, Ω — совокупность углов, характеризующих эффективно замороженную на время столкновения пространственную ориентацию молекулы, $\theta(b, \Omega)$ — функция отклонения, $f_{\alpha}(\theta)$ — известная аппаратная функция, C — известная постоянная. Согласно (1) задача расчета картины ДР сводится к нахождению функции отклонения $\theta = \theta(b, \Omega)$ для рассеяния на анизотропной ППЭ.

ППЭ исследуемых систем предложены в виде аддитивного потенциала для He — N₂ [1] и разложения по полиномам Лежандра (до пятого порядка) в случае He — CO [2]. Способ вычисления функции отклонения для таких потенциалов обсуждался в [4, 5].

Для вычисления $I(\alpha)$ по (1) на ЭВМ P-40 применялась процедура Монте-Карло, обеспечивавшая статистическую точность в 1 — 2% при реализации 10⁵ траекторий со случайными наборами b, Ω .

Вычисления в случае He — CO проведены для ряда последовательных приближений к теоретической ППЭ [2]: 1) для усредненного по ориентациям потенциала $\bar{V}(r)$ (кривая 1, рис. б); 2) для разложения, содержащего радиальные компоненты с $l = 0, 1$ (кривая 2, рис. б); 3) для разложения, содержащего компоненты с $l = 0, 1, 2$ (кривая 3, рис. б). Хотя полная ППЭ работы [2] содержит компоненты до $l = 5$, хорошая сходимость расчетов (рис. б, кривые 1, 2, 3) позволяет ограничиться $l = 2$.

Сравнение вычисленных (сплошные кривые) для обеих исследованных систем и измеренных зависимостей $I\alpha^2$ обнаруживает сильное их расхождение.

Это расхождение (аналогичные расхождения обнаружены нами для других систем, например Ar — CO₂, N₂) позволяет заключить, что СМ в ее настоящем виде недостаточно точна для использования в динамических расчетах с целью количественных предсказаний сечений упругого рассеяния и ударного возбуждения молекулярных степеней свободы. Вместе с тем представленные результаты открывают возможность коррелированного с экспериментом усовершенствования СМ.

Экспериментальные кривые для изоэлектронных систем He — CO и He — N₂ обнаруживают наличие хорошо выраженных особенностей в области $\alpha E > 10$. Угловое положение выброса $I\alpha^2$ позволяет связать эти особенности с проявлением возмущения упругого рассеяния неупругим каналом; в частности, энергетически доступным является канал возбуждения в триплетные $A^3\Sigma^+(N_2)$ и $a^3\Pi(CO)$ состояния в результате пересечения соответствующих ППЭ. Такая интерпретация поддерживается результатами недавних прямых измерений [6] неупругих потерь при рассеянии в системе Li⁺ — N₂ (Li⁺ — электроноподобен He).

Модельный расчет картины рассеяния в системе двух пересекающихся термов системы He - N₂ (один из которых \bar{V} - усредненный потенциал работы [1], а $V^*(r) = 63,6 \exp(-2,5r)$ показал, что наблюдаемая особенность качественно воспроизводится при положении точки пересечения $r_{II} = 1,15\text{А}$ (пунктирная кривая рис. а).

Этот эффект возбуждения в столкновении (запрещенного правилом сохранения полного спина) триплетного состояния открывает новый интересный объект исследования и, по-видимому, может представлять также астрономический интерес. Действительно, обратный процесс дезактивации приводит к переходу электронной энергии $\Delta V = V^*(\infty) - V(\infty)$ в кинетическую энергию отдачи, уносимой в основном атомом He ($E_{He} = (m_{N_2} / (m_{N_2} + m_{He}))\Delta V$). Следовательно такой процесс дезактивации в верхней атмосфере может служить источником нетермического потока убегающих атомов гелия.

Институт космических исследований
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
17 мая 1977 г.

Литература

- [1] В.И.Гайдаенко. ЖТФ, XVI, 852, 1976.
- [2] S. Green, P. Thaddens. The Astrophysical Journal, 205, 766, 1976.
- [3] А.П.Калинин, В.Б.Леонас. Сб. Аэромеханика и газовая динамика, М., изд. Наука, 1976 г., стр. 237.
- [4] Б.В.Зубков, А.П.Калинин, В.Б.Леонас. Приборы и техника эксперимента. №3, 1977 (в печати).
- [5] R. J. Cross. J. Chem. Phys., 46, 609, 1967.
- [6] Fernandez et al. Phys. Rev., 12A, 1252, 1976.