

УДК 537.226;573.311.32;538.956

ФИЗИКА

Г. С. Мкртчян, член-корреспондент АН Армянской ССР Д. М. Седракян

О восприимчивости газа двухатомных полярных молекул

(Представлено 10/III 1986)

В теории разреженных газов из жестких полярных молекул мнимая часть диэлектрической восприимчивости $\chi(\omega)$ имеет максимум при $\omega \sim \tau_0^{-1}$, где τ_0 — время свободного пробега молекулы, что указывает на наибольшее поглощение волн с такими частотами ⁽¹⁾. При частотах $\omega \gg \tau_0^{-1}$ это поглощение мало. В данной работе показывается, что и при $\omega \gg \tau_0^{-1}$ имеет место поглощение волн из-за наличия другого характерного времени $\tau = \sqrt{\frac{I}{2kT}}$, где I — момент инерции молекулы, T — температура. Уменьшая плотность газа, можно добиться выполнения неравенства $\tau_0 \gg \tau$. При этом $\chi(\omega)$ будет иметь второй максимум в области частот $\omega \sim \tau^{-1}$. В этой области частот газ можно считать идеальным.

Рассмотрим двухатомную полярную молекулу с дипольным моментом величиной μ . Моделью такой молекулы является ротатор (две разноименно заряженные массы на фиксированном расстоянии друг от друга). В системе центра инерции функция Гамильтона ротатора имеет вид

$$H = \frac{1}{2I} (p_\theta^2 + p_\varphi^2 \sin^2 \theta). \quad (1)$$

Здесь θ и φ — углы, определяющие ориентацию оси ротатора, p_θ , p_φ — сопряженные им импульсы, I — момент инерции ротатора. Из уравнений движения легко получить уравнения для проекции $\mu_z = \mu \cos \theta$ дипольного момента на полярную ось (ось z)

$$\frac{d^2}{dt^2} \mu_z + \Omega^2 \mu_z = 0; \quad \Omega = \sqrt{\frac{2H}{I}}. \quad (2)$$

Здесь H дается выражением (1). Решение (2), выраженное через начальные значения координат и импульсов ротатора, имеет вид

$$\mu_z(t) = \mu \cos \theta(0) \cos \Omega t - \frac{\mu}{I\Omega} p_\theta(0) \sin \theta(0) \sin \Omega t. \quad (3)$$

Важно отметить, что в этом решении частота Ω также определяется начальными условиями.

Рассмотрим теперь газ из N таких ротаторов, находящийся в равновесии с термостатом при температуре T . Вычислим функцию

отклика $\varphi(t)$ дипольного момента газа на импульс электрического поля, направленного вдоль оси z . По определению ⁽²⁾, $\varphi(t) = \int \{M_z(t)M_z(0)\} \rho d\Gamma$, где M_z — проекция электрического дипольного момента газа на направление поля, $\{ \}$ — скобки Пуассона, ρ — функция распределения Гиббса, интегрирование ведется по фазовому пространству. Все величины под интегралом относятся к газу в отсутствие внешнего поля. Для идеального газа это выражение легко вычисляется и результат имеет вид

$$\varphi(t) = \frac{N\mu^2}{3kT\tau^2} t F\left(2, \frac{3}{2}, -\frac{t^2}{4\tau^2}\right); \quad \tau = \sqrt{\frac{T}{2kT}}, \quad (4)$$

где $F(a, c, x)$ — вырожденная гипергеометрическая функция. Отсюда следует выражение для функции релаксации

$$\Phi(t) = \int_0^\infty \varphi(\eta) d\eta = \frac{N\mu^2}{2kT} F\left(1, \frac{1}{2}, -\frac{t^2}{4\tau^2}\right).$$

При $t \gg \tau$ $\Phi(t)$ степенным образом стремится к нулю. Таким образом, даже в отсутствие столкновений имеет место релаксация средней проекции дипольного момента к равновесному нулевому значению.

Для восприимчивости $\chi(\omega)$ газа из (1) получаем

$$\chi(\omega) = \int_0^\infty \varphi(t) e^{i\omega t} dt = i \frac{\pi N\mu^2}{3kT} (\omega\tau)^2 \exp(-\omega^2\tau^2) \operatorname{sign} \omega + \\ + \frac{N\mu^2}{3kT} [1 - (\omega\tau)^2 \exp(-\omega^2\tau^2) \operatorname{Ei}(\omega^2\tau^2)]. \quad (5)$$

Здесь $\operatorname{Ei}(x)$ — интегральная экспонента. Как следует из (5), $\operatorname{Im}\chi(\omega)$ имеет максимум при $\omega = \tau^{-1}$, причем этот максимум более острый, чем в области $\omega \sim \tau_0^{-1}$ ⁽¹⁾. Для молекулы HCl при $T = 300^\circ$ оценка дает $\tau \sim 10^{-13}$ с. Вещественная часть $\chi(\omega)$ совпадает с классическим пределом выражения, полученного в ⁽³⁾.

Ереванский государственный
университет

Գ. Ս. ՄԿՐՏՅԱՆ, Հայկական ՍՍՀ ԳԱ ԲՊՐԱԽԻԳ ՁԵՂՈՒ Դ. Մ. ՍԵՂՈՒԱՅԱՆ

Լեռնային երկատոմյա մուկկուկներից բաղկացած գազի դիէլեկտրիկական
բեկալունակության մասին

Հաշվված է կոշտ դիպուկներից բաղկացած գազի դիէլեկտրիկական ըն-
կալունակութունը: Հաշվարկը կատարված է մուկկուկների հարվածների հա-
ճախութունից մեծ արտաքին դաշտի հաճախութունների համար: Ցույց է

տրված, որ դիէլեկտրիկական ընկալունակության կեղծ մասը ունի մաքուր-
 մում $\omega \sim \tau^{-1}$, որտեղ $\tau = \sqrt{\frac{T}{2kT}}$ և I -բևեռային մոլեկուլի ինքնօրինակ մո-
 մենտն է:

Л И Т Е Р А Т У Р А — Գ Ր Ա Շ Ա Ն Ո Ւ Թ Յ Ո Ւ Ն

¹ Г. Фрелих, Теория диэлектриков, ИЛ, М., 1960. ² Ф. М. Куни, Статистическая физика и термодинамика, Наука, М., 1981. ³ П. Дебай, Г. Закк, Теория электрических свойств молекул, М., 1936.