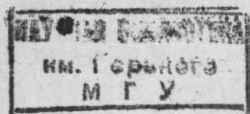


Вестник МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

№ 6 — 1966



УДК 539.196.3

А. Б. КАМНЕВ

ОБ ОДНОМ МЕТОДЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПОТЕНЦИАЛОВ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Описывается методика определения потенциалов межатомного взаимодействия в области энергии взаимодействия от 0,1 эв до нескольких электронвольт. Для определения потенциалов взаимодействия исследовалось упругое рассеяние быстрых нейтральных пучков с энергией от 600 до 4000 эв в газах. Получены результаты для всей гаммы благородных газов. Сравняются теоретические и экспериментальные данные.

В настоящей работе для атомов благородных газов экспериментально изучена область энергий взаимодействия от 0,1 до нескольких электронвольт. Экспериментальное определение межатомных потенциалов для таких энергий взаимодействия производилось методом упругого рассеяния быстрых нейтральных частиц в газах. Применяя пучки с энергиями порядка 100—1000 эв, удалось перекрыть область взаимодействий от 0,1 до нескольких электронвольт.

Выбор благородных газов в качестве объекта исследований сделан по следующим причинам.

Во-первых, необходимо апробировать метод определения межмолекулярного потенциала из данных по упругому рассеянию на наиболее простых системах, для которых имеются теоретические и экспериментальные данные [1—3].

Во-вторых, в упомянутом диапазоне энергий взаимодействия имеется еще пока единственный эксперимент, принадлежащий Амдуру и его сотрудникам [1].

В-третьих, значения потенциальной энергии взаимодействия атомов благородных газов, полученные в работах Амдура [1], для ряда систем сильно расходились с рассчитанными с помощью статистической модели атома Томаса—Ферми—Дирака [2, 3]. Эти расхождения требовали дополнительной проверки, поскольку аппаратура, используемая Амдуrom [1], обладала рядом существенных недостатков (например, плохой моноэнергетичностью пучка).

В-четвертых, в работе [1] были исследованы в основном гомоядерные системы, гетероядерные системы остались почти не исследованными.

Исследование гетероядерных систем представляет большой интерес в связи с возможностью более широкого сравнения теоретически рассчитанных потенциалов с экспериментальными и в связи с проверкой и обоснованием комбинационного правила. С помощью комбина-

ционного правила потенциал гетероядерной системы V_{ik} выражается как $V_{ik} = \sqrt{V_{ii}V_{kk}}$, где V_{ii} и V_{kk} — известные потенциалы соответствующих гомоядерных систем. Проверка правила комбинирования может иметь очень важное значение для исследования потенциалов взаимодействия сложных молекулярных систем, которые по тем или иным причинам трудно исследовать экспериментально.

Теоретические основы метода получения межмолекулярных потенциалов из экспериментов по рассеянию достаточно подробно изложены в [4, 5, 6]. Поэтому приведем лишь конечный результат. Эффективное сечение рассеяния на угол, больший угла θ_0 , который является апертурным углом установки для рассеяния на малые углы и потенциалов вида $V(r) = \frac{K}{r^n}$, можно записать:

$$S(E, \hat{\theta}_0) = \left(\frac{Kc(n)}{E\hat{\theta}_0} \right)^{-2/n}, \quad (1)$$

где E — взаимная кинетическая энергия сталкивающихся частиц, $c(n)$ — числовой множитель, K и n — параметры потенциала $V(r) = \frac{K}{r^n}$ и $\hat{\theta}_0$ — эффективная апертура установки.

Эффективное сечение $S(E, \theta_0)$ находится из соотношения $S(E, \hat{\theta}_0) = \frac{1}{nd} \lg \frac{I_0}{I}$, где I_0 — интенсивность нерассеянного пучка, I — интенсивность после прохождения рассеивающего слоя толщиной d с плотностью \bar{n} .

Если построить график $\lg S(E, \hat{\theta}_0)$ в зависимости от $\lg E$, то по формуле (1) он представится прямой линией с наклоном $-2/n$. Отсюда определяется один из потенциальных параметров n , а из формулы (1) второй — K .

Для изучения отталкивательного потенциала атомов благородных газов в настоящей работе использовались пучки в диапазоне энергии от 600 до 4000 эв. Такие энергии были выбраны из условия удобства детектирования нейтральных частиц по вторичной электронной эмиссии, так как получение и детектирование более низкоэнергетических частиц представляется весьма трудным.

Для осуществления задуманного эксперимента была создана установка, блок-схема которой представлена на рис. 1.

Нейтральный атомный пучок заданной энергии получался путем перезарядки ионного пучка в слое газа.

Источником ионного пучка служил ионный источник нировского типа (1), где положительные ионы образовывались в результате ионизации электронным ударом и после ускорения направлялись в камеру магнитного анализатора (2). Магнитный анализатор выделяет ионный пучок фиксированной массы и энергии, который затем направляется в камеру перезарядки (3). В камере перезарядки происходит перезарядка ионов на атомах газа. Неперезарядившиеся ионы отклоняются электрическим полем плоского конденсатора на детектор монитора (4), который непрерывно ведет контроль за интенсивностью ионного пучка. Коллимированный и очищенный от ионов нейтральный пучок попадает затем в камеру рассеяния (5), куда может напускаться газ, на котором происходит рассеяние. Давление рассеивающего газа контролировалось лампой ЛМ-2, работающей в специальном режиме [7].

Регистрация нейтральных частиц осуществлялась вторичным электронным множителем ВЭУОТ-8М (6). Анод множителя был соединен

с входом электрометрического усилителя, сигнал с которого подавался на самописец ЭПП-09. Такая схема регистрации позволяла надежно регистрировать токи вплоть до 10^{-14} — 10^{-15} . Подробное описание установки можно найти в [8].

Измерения производились следующим образом. Сначала измерялся нерассеянный поток I_0 , затем в камеру рассеяния напускался газ и измерялась интенсивность I после прохождения пучком слоя рассеивающего газа при известном давлении.

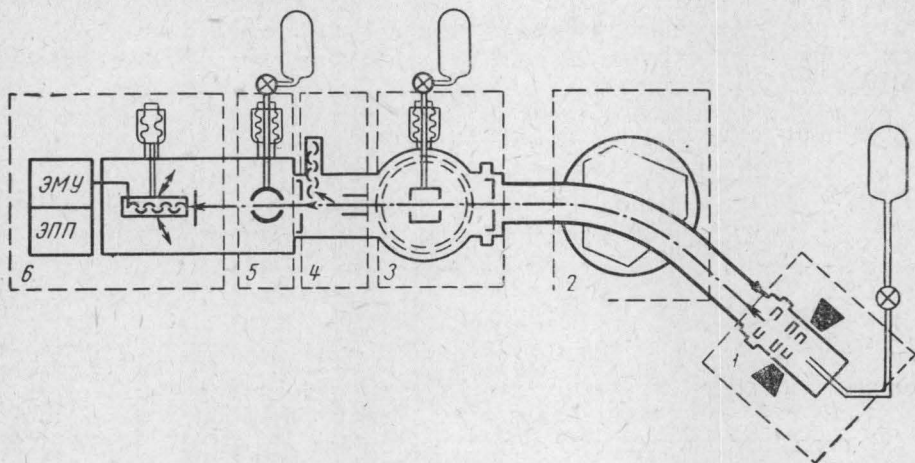


Рис. 1

Типичная запись измерения на ленту самописца приведена на рис. 2.

Для каждого значения энергии проводилось не менее 10 измерений при различных давлениях. Чтобы избежать двойных столкновений, производился контроль зависимости эффективного сечения от давления. Точность измерений эффективных сечений составляла около 1,5—2% для энергии пучков от 4000 до 1400 эв и порядка 2—4,3% в остальном диапазоне, т. е. 600 эв включительно.

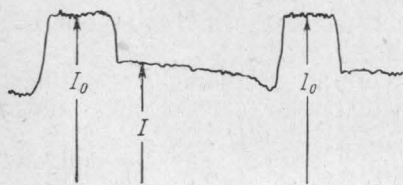


Рис. 2

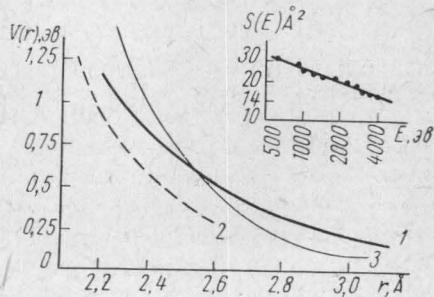


Рис. 3

Зависимость экспериментально определенного эффективного сечения рассеяния от энергии пучка для некоторых пар атомов приведена на рис. 3 и 4а. Эта зависимость в логарифмическом масштабе представляется прямой линией.

Границы области взаимодействия связаны с величиной эффективного сечения рассеяния. Действительно, если для малых углов рассея-

ния наибольшее сближение и прицельный параметр можно считать приблизительно равными $r_0 \approx b$, то $S(\theta_0) = \pi b^2$, а отсюда

$$r_{\min} = \sqrt{\frac{S(\theta_0 E_{\max})}{\pi}} \quad \text{и} \quad r_{\max} = \sqrt{\frac{S(\theta_0 E_{\min})}{\pi}}. \quad (2)$$

Параметры потенциалов, найденных в этой работе, строго говоря, действительны только в области тех расстояний, которые заключены в интервале от r_{\min} до r_{\max} . Экстраполяция этих потенциалов на более обширные области недопустима, ибо при других межатомных расстояниях те предположения, которые были положены в основу этого метода, могут уже не выполняться. Кроме того, крутизна потенциальной кривой не остается постоянной с изменением межатомных расстояний, поэтому участки, где ее можно считать постоянной, относительно невелики.

Чтобы определить потенциальный параметр K , необходимо знать точное значение величины $\hat{\theta}_0$ — разрешающей способности установки, так как

$$K = \left[\frac{S(\theta_0)}{\pi} \right]^{n/2} \frac{\theta_0 E}{C(n)}. \quad (3)$$

В случае идеального эксперимента $\theta_0 = \frac{a}{l}$, где a — полуширина детектора, а l — расстояние от места рассеяния до детектора.

В реальном эксперименте никогда не бывает бесконечно тонких слоев рассеяния и бесконечно узких пучков, особенно при рассеянии на малые углы.

Действительно, для частиц, следующих в пучке ближе к периферии нежели к центру, потребуется меньший угол отклонения (чтобы не попасть в детектор), чем центральным частицам. Такая же картина наблюдается для частиц, испытавших рассеяние на различных глубинах рассеивающего слоя. Однако нельзя усреднять просто все имеющиеся углы рассеяния для данной геометрии, ибо рассеяние на различные углы происходит с различной вероятностью. Необходимо усреднять само сечение рассеяния.

Для малых углов и потенциалов вида $V(r) = \frac{K}{r^n}$ можно показать [9], что усреднение сечения рассеяния эквивалентно усреднению величины $V(r) = \frac{k}{r^n}$. Величина $\theta(x, y, z, \dots)$ представляет переменный угол, на который должна отклониться частица, чтобы не попасть в детектор для каждой точки рассеивающего слоя.

В обсуждаемой работе применялась прямоугольная геометрия и эффективная апертура установки, вычисленная путем усреднения $\theta(x, y, z, \dots)$, была равна

$$\hat{\theta}^{-2/n} = \frac{\{[l+d]^{1+2/n} - l^{1+2/n}\} \{W^{1-2/n} - (W-2a)^{1-2/n}\}}{2ad \sqrt{\pi} \left(1 - \frac{4}{n^2}\right)} B(n), \quad (4)$$

где l — расстояние от камеры рассеяния до детектора, d — толщина камеры, $W = \omega + a$, ω — полуширина детектора, a — полуширина пучка, $B(n)$ — численный коэффициент, зависящий от Γ -функции.

Эта формула при стремлении a и d к нулю хорошо аппроксимируется обычной геометрической апертурой идеального эксперимента. При обработке результатов экспериментальных данных сначала опре-

деляется по наклону прямой $\lg S$ от $\lg E$ потенциальный параметр n , затем для найденного n по формуле (4) вычисляется $\theta_0^{-2/n}$ и затем по формуле (3) по известным уже $\theta_0^{-2/n}$ и n находится другой потенциальный параметр K .

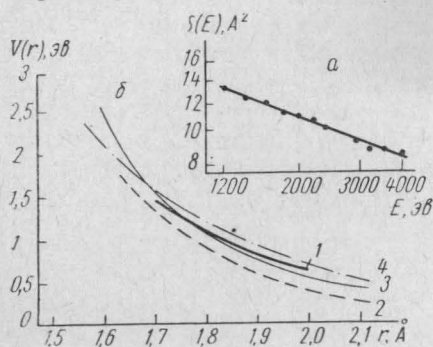


Рис. 4

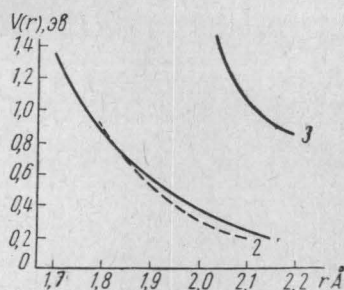


Рис. 5

Описанным выше методом были получены потенциалы взаимодействия всей гаммы благородных газов. Наиболее характерные кривые приведены на рис. 3, 4 и 5. Значения потенциальных параметров приведены в таблице.

Параметры потенциалов исследованных систем

$$V(r) = \frac{K}{r^n}$$

Система	K (эв · Å ⁿ)	n	Δr (Å)
He — He	2,8	3,9	0,87—1,23
Ne — Ne	78	7,65	1,7 —2,18
Ar — Ar	171	6,06	2,27—3,12
Kr — Kr	1382,5	7,7	2,4 —3,02
Xe — Xe	463	6,35	2,48—3,09
He — Ne	10,3	5,61	1,3 —1,65
He — Ar	22,6	5,15	1,63—2,06
He — Kr	45,3	5,52	1,67—2,04
He — Xe	35,2	5,2	1,73—2,2
Ne — Ar	99,5	6,56	1,93—2,49
Ne — Kr	437	7,65	2,15—2,52
Ar — Xe	210	6,76	2 —2,56
Ar — Kr	855	6,92	2,4 —3,1
Ar — Xe	292	5,9	2,48—3,27
Kr — Xe	875	7,1	2,44—3

Сравнение значений потенциальных энергий, полученных в настоящей работе, с работой [1] обнаруживает довольно хорошее согласие для всех систем, которые были изучены в [1]. Однако n , как правило, на 1—2 единицы выше, чем в настоящей работе. Это расхождение, по-видимому, можно объяснить недостаточной монокинетичностью пучков нейтральных частиц, которые применялись в [1], что привело к более слабой зависимости $S(E)$ от энергии.

Сравнение потенциальных кривых с теоретическими расчетами по статистической модели атома Томаса—Ферми—Дирака [2, 3] показывает, что согласие наблюдается далеко не для всех систем. Сильное

расхождение расчетных и экспериментальных значений наблюдается для системы Ne—Ne (рис. 5) и для всех систем, включающих неон.

Расхождение примерно в два раза с данными [2, 3] имеется для тяжелых газов Kr и Xe.

Сравнение экспериментально найденных потенциалов гетероядерных систем с вычисленными с помощью комбинационного правила по потенциалам гомоядерных систем показывает, что для благородных газов в области взаимодействия порядка $0,1-3 \text{ эв}$ это полуэмпирическое правило выполняется хорошо.

В заключение автор выражает благодарность В. Б. Леонасу за постановку задачи и за обсуждение полученных результатов, а также В. Г. Попову и А. В. Сермягину, принимавшим участие в работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Amdur J. Planetary and Space, Sci, **3**, 228, 1961.
2. Abrahamson A. A. Phys. Rev., **130**, 693, 1963.
3. Abrahamson A. A. Phys. Rev., **133A**, 990, 1964.
4. Гиршфельдер Дж. и др. Молекулярная теория жидкостей и газов. М., ИЛ, 1961.
5. Фирсов О. Б. ЖЭТФ, **24**, 279, 1953.
6. Kennard E. N. Kinetic Theory of Gases Mc. Graw Hill Book Co. N. Y., 1938.
7. Пенчко Е. А. «Заводская лаборатория», **27**, 214, 1961.
8. Камнев А. Б., Леонас В. Б., Попов В. Г. «Приборы и техника эксперимента» № 2, 182, 1966.
9. Сб. «Атомные и ионные столкновения». М., ИЛ, 1964.

Поступила в редакцию
17. 3 1965 г.

Кафедра
молекулярной физики