

усреднение как по реализациям, так и по сечениям сетки. Определенные таким образом значения корреляционной функции  $R_{m,n}^e$  в узлах сетки приведены на рис. 3.

В модели (12)  $r_0$  связано с внешним масштабом атмосферной турбулентности, который обычно превышает характерные размеры исследуемых процессов, например поперечных размеров  $a$  пучков когерентного излучения. Это накладывает ограничения сверху на шаг сетки  $h < a$ . Одновременно из оценки (8) и формулы (12) согласно полученным результатам следует, что число коэффициентов в алгоритме скользящего суммирования (2) должно удовлетворять условию  $M \geq 4r_0/\Delta x$ .

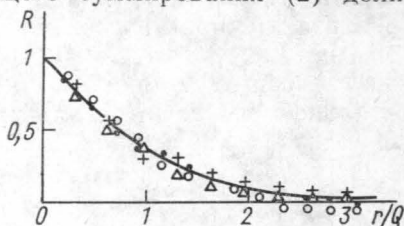


Рис. 3. Корреляционная функция поля с кармановской плотностью (12): сплошная линия —  $R(r)$  и  $R_{m,n}^e$ ; точки —  $R_{m,n}^e$ , полученная в результате усреднения по 150 реализациям —  $m=\text{const}$  (○),  $n=\text{const}$  (●),  $m=n$  (△),  $m=-n$  (+)

В результате моделирование двумерных полей вида (12) для задач распространения световых пучков в атмосфере связано с большим объемом вычислений, поскольку число слагаемых  $(2M_x+1) \cdot (2M_y+1)$  в алгоритме (2) может достигать нескольких сотен.

5. Проведенный анализ и численные эксперименты на ЭВМ показывают, что точность моделирования с помощью метода скользящего суммирования случайных полей типа (9), (10), (11), (12) с одномасштабными корреляционными функциями определяется параметром  $\alpha$ , который означает, сколько раз на расстоянии  $Mh$ , равном сдвигу  $\delta$ -коррелированного поля, формирующего  $\{\epsilon_{m,n}\}$ , укладывается эффективный радиус корреляции исследуемого поля.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Ермаков С. М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. М.: Наука, 1975.  
 [2] Метод Монте-Карло в атмосферной оптике. Под ред. Г. И. Марчука. Новосибирск: Наука, 1976. [3] Петрищев В. А. Изв. вузов. Сер. Радиофизика, 1971, № 9, с. 1416. [4] Быков В. В. Цифровое моделирование в статистической радиофизике. М.: Сов. радио, 1971. [5] Рытов С. М., Кравцов Ю. А., Татарский В. И. Введение в статистическую радиофизику. М.: Наука, 1978, ч. 2.

Поступила в редакцию  
08.02.80

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1982, Т. 23, № 1

УДК 539.196 : 621.378.325 : 546.214

#### АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ОБ УСТАНОВЛЕНИИ ГАЗОВОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ В КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВОЗБУЖДЕННОМ ОЗОНЕ

В. Я. Панченко, И. М. Сизова, А. П. Сухоруков

(кафедра общей физики и волновых процессов)

**1. Введение.** Резонансное возбуждение молекулярного газа интенсивным ИК-излучением приводит к образованию резко неравновесных населенностей колебательно-вращательных уровней молекулы. В процессе релаксации таких молекул к состоянию термодинамического равновесия вследствие нерезонансности процессов  $V-V$ ,  $V-V'$  и  $R-T$ ,

обусловленной, например, ангармоничностью, несферичностью и нежесткостью молекул, на коротких временных интервалах могут происходить локальные увеличения и уменьшения поступательной температуры газа в отличие от равномерного нагрева при неселективном возбуждении всех степеней свободы молекулы [1—3]. Времена достижения таких локальных экстремумов температуры коррелируют с характерными временами  $R-T$ ,  $V-V$ ,  $V-V'$  и  $V-T$ -процессов, их обуславливающих, и обычно намного короче времени установления общего теплового равновесия системы. Однако экспериментальное исследование кинетики поступательной температуры газа при резонансной ИК-накачке может дать информацию о скоростях важнейших для молеку-

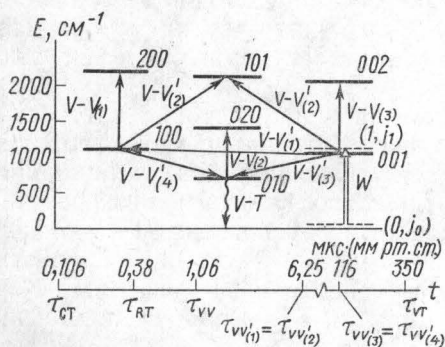


Рис. 1. Схема нижних колебательных уровней основного электронного состояния озона [5, 7]

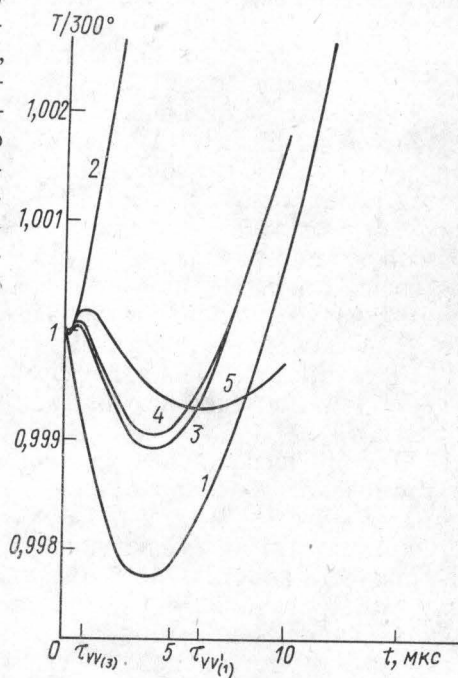


Рис. 2. Динамика установления газовой температуры озона

лы релаксационных процессов лишь при наличии достаточно простых теоретических моделей для описания процессов перехода энергии накачки из колебательно-вращательных в поступательные степени свободы [4]. К сожалению, получить наглядные аналитические решения такой задачи удастся лишь в немногих случаях, и обычно кинетика процесса описывается с помощью численных методов.

В настоящей работе приводится аналитическое описание процесса установления газовой температуры в озоне, резонансно возбуждаемом излучением с  $\lambda=9,6$  мкм в  $Q$ -ветви колебательного перехода  $O_3(000) \rightarrow O_3(001)$  при мгновенном включении излучения накачки постоянной интенсивности.

## 2. Теоретическая модель процесса.

1. Основное электронное состояние молекулы  $O_3$  моделировалось набором известных из эксперимента нижних колебательных уровней, схема которых [5] представлена на рис. 1. При этом в общем случае учитывалась детальная вращательная структура поглощающего излучение перехода  $O_3(000) \rightarrow O_3(001)$  моды  $\nu_3$ .

2. Считалось, что молекулы озона возбуждаются ИК-излучением в полосе 9,6 мкм, вращательная структура которой имеет ярко выраженные  $P$ -,  $Q$ - и  $R$ -ветви [6]. Реальная ширина излучения резонансной накачки достаточно мала ( $10^{-2}$ — $5 \cdot 10^{-3}$   $cm^{-1}$ ), поэтому непосредствен-

но в поглощении накачки участвуют лишь несколько вращательных подуровней состояния  $O_3(000)$  (что на рис. 1 условно показано штриховыми линиями), и в зависимости от частоты излучения накачивается в основном  $P$ -,  $Q$ - или  $R$ -ветвь перехода  $O_3(000) \rightarrow O_3(001)$ .

3. При описании динамики газовой температуры в общем случае учитывались процессы  $R-T$ -релаксации уровней  $O_3(000)$  и  $O_3(001)$  и процессы  $V-V$ -,  $V-V'$ - и  $V-T$ -релаксации, указанные стрелками на рис. 1, где также приведены использованные в расчетах характерные времена этих процессов [7].

На основе описанной модели для количественного анализа временного хода газовой температуры колебательно-возбужденного озона решалась замкнутая система кинетических уравнений для заселенностей колебательных уровней  $O_3$ , для вращательных подуровней, взаимодействующих с излучением, и температуры. На интересующих нас временных интервалах  $t \leq \tau_{VV}$  в расчетах не учитывалась диссоциация озона в поле ИК-излучения, так как по оценкам, сделанным в рамках модели [8], при рассматриваемых интенсивностях распадается менее 1% озона. Также не учитывался спонтанный радиационный распад колебательных уровней и диффузия возбужденных частиц из облучаемого объема вследствие больших величин характерных времен этих процессов [9].

Качественный анализ этой системы уравнений, которая здесь ввиду громоздкости не приводится, показывает, что на временах порядка времен  $R-T$ -,  $V-V$ - и  $V-V'$ -релаксации происходит конкуренция процессов, ведущих к уменьшению и увеличению газовой температуры. Возможность кинетического охлаждения газа обусловлена  $R-T$ -процессами [10] уровней 000 и 001 при накачке  $P$ -ветви перехода (вращательное охлаждение) и  $V-V'_{(1)}$ -процессом с отрицательным дефектом энергии, так как этот процесс — самый быстрый  $V-V'$ -процесс в молекуле  $O_3$  [7] (колебательно охлаждение). Остальные  $V-V'$ -,  $V-V$ - и  $V-T$ -процессы ведут к нагреву газа. При этом характер установления газовой температуры озона существенно зависит от того, какая ветвь перехода  $O_3(000) \rightarrow O_3(001)$  накачивается излучением, так как в  $P$ -ветви  $R-T$ -процесс приводит к дополнительному охлаждению газа за время  $t \sim \tau_{RT}$ , в  $R$ -ветви, — наоборот, к дополнительному нагреву [10]; при накачке же  $Q$ -ветви из-за близости энергий вращательных подуровней, участвующих в поглощении излучения,  $R-T$ -процесс вносит малый энергетический вклад в динамику поступательной температуры. Поэтому для численного решения задачи с накачкой  $P$ - или  $R$ -ветви необходимо рассматривать кинетические уравнения для каждого участвующего в поглощении излучения вращательного подуровня, что значительно увеличивает количество уравнений и затрудняет получение аналитических решений. В то же время при накачке  $Q$ -ветви система кинетических уравнений допускает значительное упрощение, так как можно не рассматривать уравнения для вращательных переходов, а в уравнениях для колебательных уровней слагаемые, описывающие накачку, вида  $\sum_i W_i (n_{j_0}^{(i)} - (g_{j_0}^{(i)} / g_{j_1}^{(i)}) n_{j_1}^{(i)})$ , — заменить слагаемым  $W(N_{000} - N_{001}/q)$ . Здесь  $n_{j_0}^{(i)}$  и  $n_{j_1}^{(i)}$  — населенности вращательных подуровней  $j^{(i)}_0$  и  $j^{(i)}_1$  уровней 000 и 001 соответственно;  $g_{j_0}^{(i)}$ ,  $g_{j_1}^{(i)}$  — статистические веса вращательных подуровней;  $N_{000}$  и  $N_{001}$  — населенности колебательных уровней 000 и 001;  $W(c^{-1}) = \sum_i W_i(t) n_{j_0}^{(i)}(t=0)$  — эффективная вероятность оптической накачки на переходе  $000 \rightarrow 001$ , а  $q$ -

фактор учитывает насыщение этого перехода при участии в поглощении доли  $x$  молекул основного состояния ( $q=1/Q=(N_{001}(0)/N_{000}(0)+x/2)/(1-x/2)$ ).

Численные расчеты, проведенные в рамках описанной выше модели с  $q$ -фактором, показали, что кривая  $T(t)$  может иметь несколько экстремумов на временах  $t \leq \tau_{VV'}$  (см., например, рис. 2, кривую 5), что обусловлено конкуренцией  $V-V$ - и  $V-V'_{(1)}$ -процессов. Число этих экстремумов существенно зависит от величин  $W$  и  $q$ . Более чем один экстремум реализуется в случае  $W \simeq 1/\tau_{VV}$  и  $q \gtrsim 0,1$ . Эти особенности динамики газовой температуры объясняются тем, что дефекты энергии  $V-V$ - и  $V-V'_{(1)}$ -процессов близки по величине (и противоположны по знаку), а скорости потоков энергии зависят от достигаемой в процессе накачки неравновесной заселенности уровня (001): для процесса  $V-V'_{(1)}$  — линейно, а для  $V-V$  — квадратично. Описанная зависимость  $T(t)$  с несколькими экстремумами обусловлена основными свойствами системы, а не влиянием формы импульса, так как получалась при численных решениях с различной формой и длительностью импульса накачки ( $\Delta\tau_d \simeq \tau_{VV}$  и  $\Delta\tau_d \gg \tau_{VV'}$ ). Поскольку экстремумы функции  $T(t)$  коррелируют с временами релаксационных процессов, представляет интерес получение аналитических решений рассмотренной системы уравнений, в частности для случая накачки  $Q$ -ветви перехода  $O_3(000) \rightarrow O_3(001)$  длинным прямоугольным импульсом ( $\Delta\tau_d \gg \tau_{VV'}$ ).

**3. Упрощение системы кинетических уравнений для случая накачки  $Q$ -ветви.** Исходная система уравнений для случая накачки  $Q$ -ветви, которую в дальнейшем для краткости будем называть «полной», состоит из восьми нелинейных уравнений для заселенностей уровней, показанных на рис. 1, и уравнения для поступательной температуры. Аналитически такая система не решается. Однако численный расчет и анализ констант реакций показывает, что из модели на рис. 1 можно выделить несколько основных уровней, упрощенные уравнения для которых допускают аналитическое решение и хорошо описывают главные особенности динамики газовой температуры при  $t < \tau_{VV(3)}$ . Такими уровнями являются уровни (000), (001), (002) и (100), для которых надо учитывать процессы  $V-V_{(3)}$  и  $V-V'_{(1)}$  и накачку  $W$ . Заселенности остальных уровней за время  $t \leq \tau_{VV(3)}$  можно считать равновесными.

В итоге сокращенная система уравнений имеет следующий вид:

$$dN_{000}/dt = -W(N_{000} - N_{001}/q) + (2/N\tau_{VV(3)})(N_{001}^2 - N_{000}N_{002}e^{-\Delta E_{VV(3)}/T}), \quad (1)$$

$$dN_{001}/dt = W(N_{000} - N_{001}/q) - (4/N\tau_{VV(3)})(N_{001}^2 - N_{000}N_{002}e^{-\Delta E_{VV(3)}/T}) - (N_{000}/N\tau_{VV'(1)})(N_{001} - N_{100}e^{-\Delta E_{VV'(1)}/T}), \quad (2)$$

$$dN_{002}/dt = (2/N\tau_{VV(3)})(N_{001}^2 - N_{000}N_{002}e^{-\Delta E_{VV(3)}/T}), \quad (3)$$

$$dN_{100}/dt = (N_{000}/N\tau_{VV'(1)})(N_{001} - N_{100}e^{-\Delta E_{VV'(1)}/T}), \quad (4)$$

$$dT/dt = (1/Nc_p) \{ \Delta E_{VV(3)} (2/N\tau_{VV(3)})(N_{001}^2 - N_{000}N_{002}e^{-\Delta E_{VV(3)}/T}) + \Delta E_{VV'(1)} (N_{000}/N\tau_{VV'(1)})(N_{001} - N_{100}e^{-\Delta E_{VV'(1)}/T}) +$$

$$\begin{aligned}
& + (N_{000}/N\tau_{VV(3,4)}') [\Delta E_{VV(3)}' (N_{001} - N_{010} e^{-\Delta E_{VV(3)}'/T}) + \\
& + \Delta E_{VV(4)}' (N_{100} - N_{010} e^{-\Delta E_{VV(4)}'/T})] \} \} . \quad (5)
\end{aligned}$$

В уравнении (5) учтен вклад процессов  $V - V'_{(3,4)}$  вследствие их большого дефекта энергии, хотя в релаксационных уравнениях эти процессы не играют заметной роли, так как  $\tau_{VV(3,4)}' \gg \tau_{VV(1)}'$ . Здесь  $N$  — концентрация молекул озона,  $N_{klm}$  — заселенность уровня ( $klm$ ),  $c_p$  — теплоемкость,  $\Delta E_x$  — дефекты энергии соответствующих прямых процессов, показанных стрелками на рис. 1 ( $\Delta E_{VV(1)}' < 0$ ). Дальнейшее упрощение системы (1)–(5) можно получить, если учесть, что при  $t \ll \tau_{VV(3,4)}'$  изменения температуры незначительны (доли градуса) и в уравнениях (1)–(4) можно положить  $T = T_{\text{нач}} = T_0$ . Тогда уравнения (1)–(4) решаются независимо от (5) и сводятся к системе трех уравнений, если использовать закон сохранения  $\sum_{j=1}^4 N_j = \text{const.}$

Пренебрегая в (1)–(5) малыми изменениями заселенностей всех уровней, кроме (000), (001), (002) и (100), полагая, что  $\Delta N_{002} \ll \Delta N_{001}$  и  $\Delta N_j \ll N_{000_{\text{нач}}}$  и учитывая описанные выше упрощения, получаем:

$$dX/dt = K(dZ/dt) - \mathcal{V}\mathcal{V}'X - (\Delta/2)Z^2, \quad (6)$$

$$dY/dt = dZ/dt - \mathcal{V}'\mathcal{V}Y, \quad (7)$$

$$\begin{aligned}
dZ/dt = X(W - 2\mathcal{V}\mathcal{V}') + Y\left(\frac{W - \mathcal{V}'\mathcal{V}}{\alpha}\right) - \\
- ZW\left(Q + 1 + \frac{1}{\alpha} + K\right) + C - \Delta Z^2, \quad (8)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
dT/dt = (1/Nc_p) \left\{ \Delta E_{VV(3)}' \mathcal{V}\mathcal{V}'X + (\Delta E_{VV(1)}' \mathcal{V}'\mathcal{V} - \right. \\
- \Delta E_{VV(4)}' \beta/\tau_{VV(4)}') Y/\alpha + \beta (\Delta E_{VV(3)}' / \tau_{VV(3)}' + \\
\left. + \Delta E_{VV(4)}' / \alpha \tau_{VV(4)}') Z + \frac{\Delta}{2} \Delta E_{VV(3)}' Z^2 \right\} \quad (9)
\end{aligned}$$

при начальных условиях  $X(0) = Y(0) = Z(0) = 0$ ;  $T(0) = T_0$ .

В уравнениях (6)–(9) введены следующие обозначения:

$$X = \Delta N_{001}(1 + K) + \Delta N_{100} + \Delta N_{000}; \quad Y = \Delta N_{001} - \Delta N_{100} \alpha; \quad Z = \Delta N_{001},$$

$$\Delta N_{klm} = N_{klm}(t) - N_{klm}(0),$$

$$K = 2(N_{001}(0)/N_{000}(0)) \exp(\Delta E_{VV(3)}/T_0),$$

$$\alpha = \exp(-\Delta E_{VV(1)}/T_0),$$

$$\beta = N_{000}(0)/N,$$

$$\mathcal{V}\mathcal{V}' = (2\beta/\tau_{VV(3)}) \cdot \exp(-\Delta E_{VV(3)}/T_0) - \text{скорость } V - V_{(3)}\text{-процесса,}$$

$$\mathcal{V}'\mathcal{V} = (\beta/\tau_{VV(1)}) \alpha - \text{скорость } V - V'_{(1)}\text{-процесса,}$$

$\Delta = 4/N \tau_{VV(3)}$  — нелинейный член системы уравнений, появляющийся вследствие  $V-V_{(3)}$ -процесса,  
 $C = W(N_{000}(0) - QN_{001}(0))$  — накачка в начальный момент времени,  
 $Q = 1/q$ .

**4. Решение упрощенной системы уравнений.** Система уравнений (6)–(9) нелинейная, но может быть достаточно хорошо решена методом последовательных приближений. На рис. 2 цифрами 1–4 обозначены кривые, соответствующие разным приближениям решения (6)–(9). Расчет сделан при значениях параметров:  $T_0 = 300$  К,  $W = 2$  с<sup>-1</sup>,  $p = 1$  мм рт. ст.,  $q = 0,25$ ; для остальных констант использованы экспериментальные данные из работ [5,7]

( $q$ -фактор взят близким к экспериментально полученному в [7,11]). Надо заметить, что система (6)–(9), так же как и «полная» система уравнений, обладает свойством подобия по переменной ( $pt$ ) и параметру ( $W/p$ ), поэтому любое решение является одновременно целым классом решений. Кривая 1 соответствует аналитическому решению линейной системы (6)–(9) при

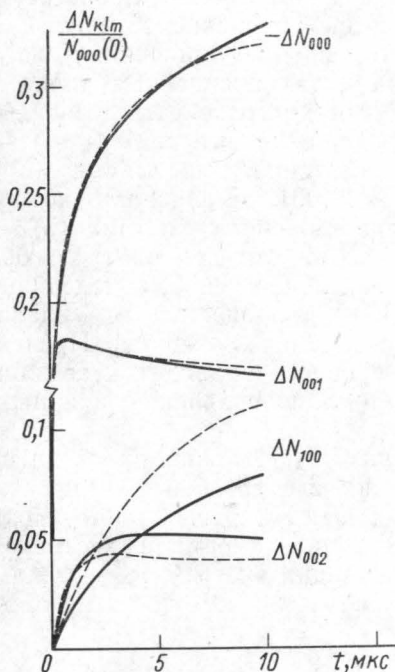


Рис. 3. Динамика изменения населенностей уровней (000), (001), (002) и (100). Численный счет по «полной» системе кинетических уравнений (сплошные кривые) и по системе (6)–(9) (пунктир). Значения параметров те же, что и на рис. 2

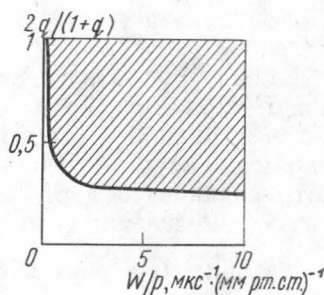


Рис. 4. Области изменения  $W$  и  $q$ , в которых имеют место качественно различные зависимости газовой температуры от времени

$\Delta = 0$  (нулевое приближение по  $\Delta$ ). Кривая 2 соответствует решению (6)–(8) при  $\Delta = 0$  и интегрированию (9) при  $\Delta \neq 0$ . Кривая 3 соответствует  $Y(t)$  и  $Z(t)$ , полученным в нулевом, а  $X(t)$  и  $T(t)$  — в первом приближении по  $\Delta$ . Кривая 4 получена численным интегрированием системы (6)–(9) с  $\Delta \neq 0$ . Из рис. 2 видно, что приближение 3 хорошо списывает точное решение системы (6)–(9). Приближение 1 верно отражает общий ход кривой  $T(t)$ , однако пренебрежение квадратичным вкладом  $V-V_{(3)}$ -процесса ( $\Delta = 0$ ) приводит к потере информации о дополнительных экстремумах при  $t \approx \tau_{VV(3)}$ . Приближение 2 качественно неверно, так как в этом случае вклад  $V-V$ -процесса в динамику температуры, пропорциональный  $(\nu^{\rho c} X + (\Delta/2) Z^2)$ , все время по-

ложителен, тогда как в точном решении 4 и в приближениях 1 и 3 он практически равен 0 при  $t > \tau_{VV(3)}$ . Поэтому кривая 2 при  $t > \tau_{VV(3)}$  сильно завышена.

**5. Анализ результатов.** Таким образом, аналитическая зависимость  $T^{(3)}(t)$ , полученная в приближении 3, верно отражает все особенности точного решения системы уравнений (6)—(9). Кривой 5 на рис. 2 представлена функция  $T(t)$ , полученная численным решением «полной» системы уравнений для рассматриваемого нами случая. Видно, что качественно система (6)—(9) правильно описывает динамику газовой температуры. Основные количественные отличия обусловлены пренебрежением в уравнениях (6)—(9) и (1)—(5) ролью процесса  $V—V_{(1)}$ . Получить приближенное аналитическое решение с учетом  $V—V_{(1)}$ -процесса не удастся, так как в этом случае упрощенная система типа (6)—(9) содержит пять уравнений и два нелинейных члена. На рис. 3 показаны зависимости заселенностей колебательных уровней от времени, получающиеся при численном решении системы (6)—(9) (пунктир) и «полной» системы уравнений (сплошные кривые). Отличия в основном существенны для уровня (100), заселенность которого сильно завышена при использовании приближенной системы (6)—(9) вследствие пренебрежения  $V—V_{(1)}$ -процессом. Это приводит к более быстрому стремлению к нулю разности заселенностей  $Y$ , определяющей отрицательный температурный вклад  $V—V_{(1)}$ -процесса и, следовательно, к укорачиванию времени кинетического охлаждения. Пренебрежение температурным вкладом  $V—V_{(1)}$ -процесса приводит к сглаживанию максимума при  $t \approx \tau_{VV}$  на кривых 3—4 по сравнению с кривой 5 (см. рис. 2).

С помощью аналитического решения  $T^{(3)}(t)$  можно проследить за изменением характера временной зависимости газовой температуры в широком интервале изменения  $W$  и  $q(Q)$ . На рис. 4 заштрихована область изменения  $W$  и  $q$ , при которых кривая имеет три экстремума. В незаштрихованной области  $T^{(3)}(t)$  имеет один экстремум — минимум при  $t \approx \tau_{VV(1)}$ . Результаты получены численными методами путем решения уравнения  $dT^{(3)}/dt = 0$  относительно  $t$ .

Найденное аналитическое выражение для  $dT^{(3)}/dt(t)$  позволяет в принципе с помощью несложных стандартных численных методов решать на ЭВМ обратную задачу нахождения времен  $\tau_{VV(1)}$  и  $\tau_{VV(3)}$  и величины  $q$  по экспериментально измеренным временам достижения экстремумов функции  $T(t)$  в пределах точности модели, представленной уравнениями (6)—(9). Однако подробное решение такой задачи требует отдельного рассмотрения.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Никитин Е. Е., Осипов А. И. Колебательная релаксация в газах. М.: Изд-во ВИНТИ, 1977. [2] Гордиец Б. Ф., Осипов А. Н., Хохлов Р. В. ЖТФ, 1974, 44, с. 1063. [3] Гордиенко В. М., Горшков В. А., Панченко В. Я., Сухоруков А. П. ЖЭТФ, 1977, 73, с. 874. [4] Ахманов С. А., Гордиенко В. М., Михеенко А. В., Панченко В. Я. Письма в ЖЭТФ, 1977, 26, с. 603. [5] Barbe A., Secroun C., Jouve P. J. Mol. Spectr., 1974, 49, N 2, p. 171. [6] Barbe A., Secroun C., Jouve P., Monnanteuil N., Depannemaeker J. C., Duterage B., Bellet J., Pinson P. J. Mol. Spectr., 1977, 64, N 3, p. 343. [7] Rosen D. I., Cool T. A. J. Chem. Phys., 1973, 59, N 11, p. 6097; J. Chem. Phys., 1975, 62, N 2, p. 466. [8] Гордиец Б. Ф., Осипов А. И., Панченко В. Я. Труды ФИАН (т. 107), М.: Наука, 1979, с. 68. [9] von Rosenberg C. W., Traipog D. E. J. Chem. Phys., 1974, 61, N 6, p. 2442. [10] Гордиец Б. Ф., Панченко В. Я. Письма в ЖТФ, 1978, 4, № 23, с. 1396. [11] West G. A., Weston R. E., Jr., Flynn G. W. Chem. Phys. Lett., 1978, 56, N 3, p. 429.