

УДК 537.226

Г. С. МКРТЧЯН, Э. С. ЮЗБАШЯН

О ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ В ГАЗЕ ПОЛЯРНЫХ МОЛЕКУЛ

Рассчитана функция распределения проекции дипольного момента полярной молекулы на направление внешнего электрического поля.

В работе [1] была рассчитана функция релаксации газа полярных молекул во внешнем электрическом поле. Представляет интерес также вычислить вероятность обнаружения у молекулы данного значения проекции дипольного момента μ на направление электрического поля (направление оси z). Таким образом, в данной работе рассчитывается функция распределения $f(\mu_z, t)$. Исходной для вычислений является формула [2]

$$f(\mu_z, t) = \int \delta(\mu_z - \mu_z(p, q)) \rho(p, q, t) d\Gamma \quad (1)$$

Здесь p, q — начальные значения обобщенных координат и импульсов молекулы, $\rho(p, q, t)$ — функция распределения, зависимость от времени которой обусловлена включением внешнего электрического поля, $d\Gamma$ — элемент объема фазового пространства молекулы. Допустим, что поле $E(t)$ включается в момент $t=0$.

К этому моменту газ находился в равновесии с термостатом при температуре T . Пусть, как и в работе [1], моделью полярной молекулы служит ротор. Функция распределения для молекулы газа в момент $t=0$ имела вид

$$\rho_0 = \exp\left[-\frac{H}{T}\right] \left\{ \int \exp\left[-\frac{H}{T}\right] \right\}^{-1}, \quad (2)$$

где

$$H = \frac{1}{2J} (P_\theta^2 + P_\varphi^2 \sin^2 \theta) \quad (3)$$

— функция Гамильтона ротора с моментом инерции J . Направление оси z принято за полярную ось.

Поскольку поле $E(t)$ считается слабым, то можно использовать метод теории линейной реакции системы на механические возмущения [2]. Получим

$$f(\mu_z, t) = \int \delta(\mu_z - \mu \cos \theta) \rho_0 d\Gamma + \\ + \frac{1}{T} \int_0^t d\eta E(t - \eta) \int \delta(\mu_z - \mu \cos \theta) \mu_z(\theta, P_\theta, -t) \rho_0 d\Gamma.$$

Находя μ_z из уравнений движения с функцией Гамильтона (3), после простых преобразований получаем

$$f(\mu_z, t) = \frac{1}{2\mu} + \frac{1}{\Gamma} \frac{2}{\tau^2} \frac{\mu_z}{\mu} \int_0^t d\eta E(t-\eta) \gamma F\left(2, \frac{3}{2}, -\frac{\eta^2}{\tau^2}\right). \quad (4)$$

Здесь

$$\tau = \left(\frac{2J}{\Gamma}\right)^{1/2}, \quad (5)$$

$F(a, c, x)$ — вырожденная гипергеометрическая функция.

Легко проверить выполнение условия нормировки $f(\mu_z, t)$:

$$\int_{-\mu}^{\mu} f(\mu_z) d\mu_z = 1.$$

Для частного случая $E = E_0 \theta(t)$, где $\theta(t)$ — тета-функция, получаем:

$$f(\mu_z, t) = \frac{1}{2\mu} + \frac{E_0}{2\Gamma} \frac{\mu_z}{\mu} \left[1 - F\left(1, \frac{1}{2}, -\frac{t^2}{\tau^2}\right) \right].$$

Вычлним с помощью (6) среднее значение μ_z :

$$\begin{aligned} \langle \mu_z \rangle &= \int_{-\mu}^{\mu} f(\mu_z, t) \mu_z d\mu_z = \\ &= \frac{1}{3} \frac{\mu^2 E_0}{\Gamma} \left[1 - F\left(1, \frac{1}{2}, -\frac{t^2}{\tau^2}\right) \right]. \end{aligned}$$

Этот результат, как и следовало ожидать, совпадает с результатом работы [1].

Кафедра общей физики

Поступило 12.02.1987

ЛИТЕРАТУРА

1. Мкртчян Г. С., Седракян Д. М. Бесстолкновительная релаксация дипольного момента.—Уч. зап. ЕГУ, 1986, № 2, с. 56.
2. Кунч Ф. М. Статистическая физика и термодинамика. Наука: М., 1981.

Ա Վ Փ Ն Փ Ն Վ

Ստացված է արտաքին էլեկտրական դաշտի ուղղութայն վրա բևեռացված մոլեկուլների դիպոլային մոմենտի պրոյեկցիայի բաշխման ֆունկցիան:

Summary

The distribution function of the dipole momentum projection of polarized molecules on the external electric field direction has been calculated.