

УДК 537.226

### О ВОСПРИИМЧИВОСТИ ГАЗА ПОЛЯРНЫХ МОЛЕКУЛ

В работе [1] была вычислена диэлектрическая восприимчивость газа из двухатомных полярных молекул. В настоящей работе рассматривается более общий случай газа, моделью молекул которого служит симметрический волчок с моментами инерции  $J_1 = J_2 \neq J_3$  и постоянным электрическим дипольным моментом  $\mu$ , направленным вдоль оси симметрии волчка. В системе центра инерции функции Гамильтона свободного волчка имеет вид [2]:

$$H = \frac{1}{2J_1 \sin^2 \theta} (p_\varphi - p_\psi \cos \theta)^2 + \frac{p_\psi^2}{2J_3} + \frac{p_\theta^2}{2J_1}.$$

Здесь  $\theta$ ,  $\varphi$ ,  $\psi$  — углы Эйлера. Импульсы  $p_\psi$  и  $p_\varphi$  при этом являются интегралами движения. Из уравнений движения легко получить уравнение для проекции  $\mu_z = \mu \cos \theta$  дипольного момента на ось  $z$  неподвижной системы координат.

$$\ddot{\mu}_z + \Omega^2 \mu_z = \frac{\mu}{J_1^2} p_\psi p_\varphi, \quad \Omega^2 = \frac{2H}{J_1} + \frac{p_\psi^2}{J_1} \left( \frac{1}{J_1} - \frac{1}{J_3} \right).$$

Решение этого уравнения, выраженное через начальные значения  $\theta(0)$   $p_\theta(0)$ , имеет вид

$$\mu_z(t) = C + (\mu \cos \theta(0) - C) \cos \Omega t + \frac{p_\theta(0) \mu}{J_1 \Omega} \sin \theta(0) \sin \Omega t; \quad C = \frac{\mu}{J_1^2 \Omega^2} p_\psi p_\varphi.$$

Пусть газ из  $N$  таких волчков находится в равновесии с термостатом при температуре  $T$ . Восприимчивость газа по отношению к электрическому полю, направленному вдоль оси  $z$ , определяется выражением [3].

$$\chi(\omega) = \frac{N}{T} \int_0^{\infty} \langle \mu_z(t) \dot{\mu}_z(0) \rangle e^{i\omega t} dt,$$

$$\text{где } \langle \mu_z(t) \dot{\mu}_z(0) \rangle = \left( \int \exp \left[ -\frac{H}{T} \right] \mu_z(t) \dot{\mu}_z(0) d\Gamma \right) \left( \int \exp \left[ -\frac{H}{T} \right] d\Gamma \right)^{-1},$$

$d\Gamma$  — элемент объема фазового пространства волчка.

Результат вычислений для  $\text{Im} \chi(\omega)$  имеет вид

$$\text{Im} \chi(\omega) = \frac{\sqrt{\pi}}{6\sqrt{2}} \frac{NJ_1^2 \mu^2 \omega^3}{T^{3/2} J_3^{1/2}} \exp \left( -\frac{\omega^2 J_1}{2T} \right) \cdot \left[ \left( 1 - \frac{1}{2\varepsilon} \right) \sqrt{\frac{\pi}{\varepsilon}} \text{erf}(\sqrt{\varepsilon}) + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{\varepsilon} e^{-\varepsilon} \right\}, \quad (1)$$

где  $\operatorname{erf}(x)$  — функция ошибок [4], а

$$\varepsilon = \frac{\omega^2 J_1}{2\Gamma} \left( \frac{J_1}{J_3} - 1 \right).$$

Переходя в (1) к пределу  $J_3 \rightarrow 0$  (ротатор), получаем результат работы [1]:

$$\operatorname{Im}\chi(\omega) = -\frac{\pi}{3} \frac{N\mu^2}{T} \left( \frac{\omega}{\omega_0} \right)^2 \exp \left[ - \left( \frac{\omega}{\omega_0} \right)^2 \right] \operatorname{sign} \omega,$$

где 
$$\omega_0 = \left( \frac{2\Gamma}{J_1} \right)^{1/2}. \quad (2)$$

Выражение (1) упрощается также в случае, если  $J_1 \approx J_3$  (почти сферический волчок):

$$\operatorname{Im}\chi(\omega) = -\frac{4\sqrt{\pi}}{9} \frac{N\mu^2}{T} \left( \frac{\omega}{\omega_0} \right)^3 \exp \left[ - \left( \frac{\omega}{\omega_0} \right)^2 \right],$$

где  $\omega_0$  дается выражением (2). Реальные части  $\chi(\omega)$  в этих двух случаях легко вычисляются с помощью дисперсионных соотношений [3]. В общем случае (1)  $\operatorname{Im}\chi(\omega)$  имеет максимум при некоторой частоте  $\omega_{\max}$  ( $J_1, J_3, T$ ). Выражение (1), полученное в предположении идеальности газа, справедливо в области частот, больших, чем частота  $\omega_c$  столкновений молекул в газе. Выполнения условия  $\omega_{\max} \gg \omega_c$  можно добиться, меняя температуру или плотность газа.

Г. С. МКРТЧЯН, Д. М. СЕДРАКЯН

Кафедра общей физики

Поступило 18.09.1986

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Мкртчян Г. С., Седракиан Д. М. О восприимчивости газа двухатомных полярных молекул.— Доклады АН Арм. ССР, 1986, т. LXXXIII, № 3, с. 115.
2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Механика. М.: Наука, 1973.
3. Куни Ф. М. Статистическая физика и термодинамика. М.: Наука, 1981.
4. Корн Г., Корн Т. Справочник по элементарной математике. М.: Наука, 1977.

Գ. Ս. ՄԿՐՏՉՅԱՆ, Գ. Մ. ՍԵԴՐԱԿՅԱՆ

ԲԵՎԵՌԱՅԻՆ ՄՈՒԵԿՈՒԼՆԵՐԻՑ ԲԱԳԿԱՅԱՑ ԳԱԶԻ  
ԸՆԿԱՎՈՒՆԱԿՈՒԹՅԱՆ ՄԱՍԻՆ

#### Ա մ փ ո փ ո ս մ

Ստացված է բևեռային մոլեկուլներից բաղկացած գազի դիէլեկտրիկ ընկալունակությունը: Հաշվարկը կատարված է այնպիսի հաճախությունների տիրույթում, որոնք մեծ են մոլեկուլների միմյանց հետ բախումների հաճախությունից: