

ПЛАЗМЕННОЕ ОКИСЛЕНИЕ ИЗОТОПОВ УГЛЕРОДА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

В.А. Хан, В.Ф. Мышкин, И.А. Ушаков

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: gos100@tpu.ru

Известно, что все физико-химические процессы селективны по изотопам, а магнитное поле может значительно изменить относительную химическую активность изотопов в зависимости от спина ядра. При этом, при столкновении радикалов в магнитном поле возможны 4 комбинации ориентации спинов валентных электронов. Принято считать, что доля синглетного (реакционноспособного) состояния составляет 25% [1]. Это связано с неразличимостью энергий спинов направлений $+1/2$ или $-1/2$ с разными фазами прецессии, например в опытах Герлаха и Штерна. Принцип неопределенности для проекций спина S_x и S_y записывается в виде $\Delta S_x \Delta S_y \geq \hbar / 2 |\langle S_z \rangle|$. При $\langle S_z \rangle = \hbar / 2$ с дисперсией $\Delta S_z = 0$ получаем $\Delta S_x \Delta S_y \geq (\hbar / 2)^2$. При одинаковой дисперсии проекций спина (на оси OX и OY) $\Delta S_y \approx \Delta S_x = \hbar / 2$, что с учетом величины спина $|S| = \sqrt{3} / 2 \hbar$ (а поэтому $S_x = \sqrt{2} / 2 \hbar$) вызывает ошибку в определении фазы прецессии спина $\Delta \varphi \approx 30^\circ$ в магнитном поле. Поэтому можно выделить $n = 2\pi / \Delta \varphi \approx 12$ дискретных значений фазы прецессии спина валентного электрона радикала, реализующихся при различных физико-химических процессах как «дискретные» состояния.

С учетом дискретности фазы прецессии спина одного из радикалов, можно регистрировать n синглетных состояний S при их столкновении со вторым радикалом с осесимметричным направлением спина. Триплетные состояния могут быть реализованы: $T_0 - n(n-1)$; T_1 и $T_{+1} - n^2$ способами. Доля синглетных состояний, из всего возможного набора, составляет $1/3n = 2,7\%$ а не 25%. С учетом частоты столкновений частиц в единице объема газа выражение для частоты формирования синглетного состояния при столкновении радикалов во внешнем постоянном магнитном поле

$$v_s = \frac{1}{36} \frac{\sqrt{2}}{2} \bar{v} \sigma [R1][R2], \text{ синглет/см}^3 \quad (1)$$

где $R1, R2$ – концентрации радикалов двух типов, \bar{v} – средняя относительная скорость теплового движения, σ – эффективное сечение столкновения радикалов двух типов.

Уравнение химической реакции также пропорционально произведению реагентов

$$\frac{d[R1]}{dt} = v_s = k [R1][R2]. \quad (2)$$

Из сопоставления выражений (1) и (2) видно, что const химической реакции можно записать в виде $k = (\sqrt{2} : 72) \bar{v} \sigma$. Полученная формула для const не учитывает релаксацию избыточной энергии продуктов реакции, и соответственно вероятности их развала. Для оценки константы скорости окисления углерода в низкотемпературной плазме примем относительную скорость при 1500С $\bar{v} \approx 3 \cdot 10^5$ см/с, а эффективное сечение столкновения $\sigma \approx 5 \cdot 10^{-15}$ см². В результате получаем оценку $k \approx 3 \cdot 10^{-11}$ см⁶/с. Эта величина близка к экспериментальному значению ($5 \cdot 10^{-11}$ см⁶/с), приведенному в базе NIST для окисления углерода.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мышкин В. Ф., Ижойкин Д. А., Ушаков И. А., Хан В. А. Моделирование изотопных эффектов в плазменных процессах, протекающих в магнитном поле // Известия вузов. Физика. - 2012 - Т. 55 - №. 11/2 - С. 348-352.