

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 621.373 : 535

О ВОЗМОЖНОСТИ СОЗДАНИЯ ЛАЗЕРА
НА КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНЫХ ПЕРЕХОДАХ
МОЛЕКУЛЫ HD

Ю. В. Евдокимов

В настоящей работе проведена оценка коэффициента усиления на колебательно-вращательных переходах молекулы HD. Впервые на возможность получения генерации в такой системе было указано Басовым, Ораевским и Сучковым [1].

Молекула HD представляет определенный интерес с точки зрения возможности создания лазера на длине волны порядка 3–4 мкм. Это обусловлено, во-первых, относительно большой вероятностью спонтанного перехода между колебательными уровнями (по отношению к гомоядерным двухатомным молекулам) и, во-вторых, сильной ангармоничностью молекулы.

Относительно большая вероятность спонтанного перехода связана с частичным снятием запрета на дипольные переходы для двухатомных гетероядерных молекул. Следует отметить, что вероятность дипольного перехода между колебательными уровнями тем больше, чем больше относительная разность масс ядер. Наибольшая вероятность дипольных переходов должна наблюдаться для молекул HD и HT.

Степень ангармоничности молекулы в значительной мере определяет благоприятное распределение заселенностей по колебательным уровням. Причем, чем больше постоянная ангармоничности молекулы, тем больше вероятность заселения более высоких колебательных уровней. Вероятности прямого и обратного процессов колебательно-колебательной релаксации системы ангармонических осцилляторов связаны следующим соотношением [2]:

$$P_{v+1, v}^{v'-1, v'} = P_{v, v+1}^{v', v'-1} \exp \left[\frac{2hc\omega_e \chi_e (v' - v)}{kT} \right], \quad (1)$$

где T — газовая температура, ω_e — колебательная частота, χ_e — параметр ангармоничности.

Из данного соотношения следует, что чем больше $\omega_e \chi_e$, тем больше вероятность заселения более высокого колебательного уровня при колебательно-колебательной релаксации. Для молекулы HD $\omega_e \chi_e = 95.0 \text{ см}^{-1}$, в то время как для CO $\omega_e \chi_e = 13.46 \text{ см}^{-1}$. Для окиси углерода вероятность перезаселения верхних колебательных уровней (относительно бальмановского распределения) велика при низких температурах, в то время как для HD это может иметь место даже при температурах, близких к комнатной.

Оценим коэффициент усиления для колебательно-вращательного перехода $v+1 \rightarrow v$, $j-1 \rightarrow j$ (P-ветвь). Пусть $T=300 \text{ К}$. Рассмотрим случай больших давлений (порядка 10 атм), когда ширина линии в основном определяется столкновениями. Для определения коэффициента усиления в центре линии воспользуемся формулой

$$k_0 = \frac{A_{v+1, v} \lambda_{v+1, v}^4}{8\pi^2 c \Delta\lambda_{\text{ст.}}} \frac{B_v hc}{kT} N_v (2j-1) \exp \left[-\frac{B_v hc}{kT} j(j+1) \right] \times \\ \times \left\{ \frac{N_{v+1}}{N_v} \exp \left[\frac{B_v hc}{kT} 2j \right] - 1 \right\}. \quad (2)$$

Здесь $A_{v+1, v}$ — коэффициент Эйнштейна для спонтанного излучения, $\lambda_{v+1, v}$ — длина волны ($\lambda_{10}=2.753 \text{ мкм}$, $\lambda_{21}=2.895 \text{ мкм}$, $\lambda_{32}=3.048 \text{ мкм}$, $\lambda_{43}=3.216 \text{ мкм}$ и т. д.), $\Delta\lambda_{\text{ст.}}$ — столкновительная ширина ($\Delta\lambda_{\text{ст.}}=7.7 \cdot 10^{-10} \text{ см/атм}$ [3]), B_v — вращательная постоянная (для простоты принято $B_v=B_{v+1}$), N_v и N_{v+1} — заселенности соответствующих колебательных уровней.

Для вычисления k_0 предварительно необходимо найти $A_{v+1, v}$, N_v и N_{v+1}/N_v . При определении $A_{v+1, v}$ воспользуемся следующим соотношением

$$A_{v+1, v} = \left(\frac{E_{v+1} - E_v}{E_1 - E_0} \right)^2 \frac{\left(\frac{1}{\chi_e} - 2 \right)^2 \left(\frac{1}{\chi_e} - 1 \right)}{\left(\frac{1}{\chi_e} - 3 \right) \left(\frac{1}{\chi_e} - 5 \right)} \times \\ \times \frac{(v+1) \left(\frac{1}{\chi_e} - 2v - 3 \right) \left(\frac{1}{\chi_e} - 2v - 5 \right)}{\left(\frac{1}{\chi_e} - 2v - 2 \right)^2 \left(\frac{1}{\chi_e} - v - 1 \right)} A_{10}. \quad (3)$$

Здесь E — энергия v -го колебательного уровня. Из экспериментальных данных работы [3] следует $A_{10} = 3 \cdot 10^{-5} \text{ с}^{-1}$.

Обычный метод определения N_v и N_{v+1}/N_v заключается в решении кинетических уравнений [2]. С целью упрощения задачи воспользуемся тем обстоятельством, что

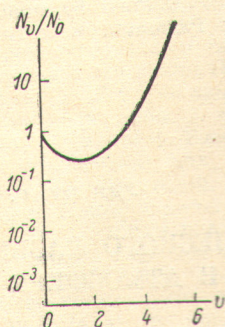


Рис. 1. Триноровское распределение заселенностей колебательных уровней для $T=300 \text{ К}$.

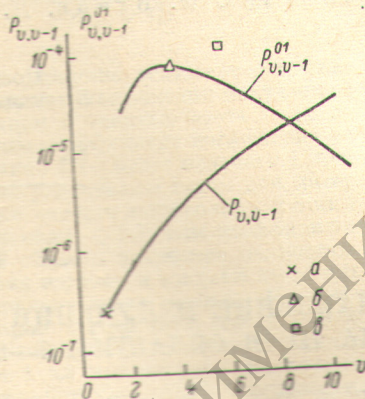


Рис. 2. Зависимости вероятностей колебательных переходов от номера уровня.

a — экспериментальное значение $P_{v,v-1}$, полученное в работе [3]; $б$ — экспериментальное значение $P_{v,v-1}^{01}$ для водорода H_2 ; $в$ — экспериментальное значение $P_{v,v-1}^{01}$ для дейтерия D_2 по данным работы [3].

для небольших значений v колебательно-колебательные переходы преобладают над колебательно-поступательными переходами. В этом случае распределение заселенностей по колебательным уровням является триноровским [2, 4]

$$N_v = N_0 \exp \left[-\frac{vE_1}{kT_1} + \frac{vE_1 - E_v}{kT} \right], \quad (4)$$

где

$$E_v = hc\omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right) - hc\omega_e \chi_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2,$$

T_1 — колебательная температура первого колебательного уровня.

Параметр T_1 характеризует накачку системы. На рис. 1 приведена зависимость N_v от v для $T_1 = 5000 \text{ К}$. Эта кривая достаточно хорошо описывает заселенности колебательных уровней при условии, что вероятность колебательно-колебательных релаксаций ($P_{v', v'+1}$) много больше вероятности колебательно-поступательных релаксаций ($P_{v', v-1}$). Вероятности колебательно-колебательных и колебательно-поступательных релаксаций были вычислены по модифицированным формулам Герцфельда [3]. Для нормировки использовались экспериментальные данные [5, 6], причем вероятности колебательно-колебательных переходов нормировались по водороду (H_2). Результаты вычислений представлены на рис. 2. Из рис. 2 видно, что для значений $v < 8$ $P_{v', v'+1} \gg P_{v', v-1}$, и, следовательно, можно воспользоваться формулой триноровского распределения для нахождения N_v .

Из рис. 1 видно, что уже для $v=2$ имеет место $N_{v+1}/N_v \sim 1$. В дальнейшем при оценках будем считать $N_{v+1}/N_v = 1$.

С учетом сделанных предположений наибольшие значения коэффициента усиления получены для переходов с небольшими значениями j . Например, для $j=2$ ($v=3$) имеем $k_0 = 10^{-3} \text{ см}^{-1}$.

Принимая во внимание полученные данные, представляется реальным достижение достаточно большого коэффициента усиления порядка 10^{-3} см^{-1} и создание лазера на колебательно-вращательных переходах молекулы HD.

Отметим, что для молекулы HD довольно велики вероятности переходов с $\Delta v=2$, 3, 4, например $A_{20} \sim A_{10}$. Следовательно, можно надеяться на получение достаточно больших коэффициентов усиления и в более коротковолновой области.

Автор благодарит А. А. Мака и С. Е. Потапова за обсуждение проведенных оценок.

Литература

- [1] Н. Г. Басов, А. Н. Ораевский, А. Ф. Сучков. Письма ЖЭТФ, 16, 301, 1972.
- [2] Н. Н. Соболев, В. В. Соколов. Усп. физ. наук, 110, 191, 1973.
- [3] A. R. W. McKellar. Canad. J. Phys., 52, 1144, 1974.
- [4] C. E. Treanor, J. W. Rich, R. G. Rehm. J. Chem. Phys., 48, 1728, 1968.
- [5] B. M. Hopkins, H. L. Chen. J. Chem. Phys., 57, 3161, 1972.
- [6] D. A. Jennings, W. Braun, H. P. Broida. J. Chem. Phys., 59, 4305, 1973.

Поступило в Редакцию 20 ноября 1975 г.
В окончательной Редакции 4 января 1978 г.

УДК 535.34 : 621.373 : 535

ОСЛАБЛЕНИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ ХИМИЧЕСКОГО ЛАЗЕРА НА HF В ОБЛАСТИ 2.7—3.3 мкм В АТМОСФЕРЕ

Г. Ф. Банах, О. К. Войцеховская и И. И. Ипполитов

В последние годы большое развитие получили химические лазеры на молекулах фтористого водорода. Эти лазеры обладают богатым спектром генерируемых длин волн — от 2.7 до 3.3 мкм. Спектр генерации HF-лазеров исследуется в целом ряде работ [1-5]. В работе [6] установлено, что генерация происходит на P -полосах с 1—0 по 5—4, причем самой интенсивной является полоса 2—1. Интерес к HF-лазерам обусловлен их мощностью, а также тем, что некоторые линии попадают в «окна» прозрачности атмосферы, являясь перспективными для целей атмосферной оптики. Целью настоящей работы является изучение именно таких линий.

Для оценки пропускания излучения HF-лазера в атмосфере было рассчитано поглощение водяным паром и углекислым газом как основными поглощающими компонентами атмосферы в данной области длин волн. Основной вклад в поглощение излучения водяным паром вносят линии колебательно-вращательных полос ν_1 , ν_3 , а также полосы первого обертона основного колебания $2\nu_2$, «горячих» полос 030—010, 011—010, 110—010 основного изотопа. Кроме этого, здесь присутствуют линии полос ν_1 , ν_3 , $2\nu_2$ изотопов H_2O^{17} , H_2O^{18} . Параметры колебательно-вращательных линий водяного пара (центры линий, полуширины и интенсивности), необходимые для расчета поглощения, брались из работы [7]. За поглощение углекислым газом в интересующей нас области ответственны следующие колебательно-вращательные полосы: 00°0—02°1, 00°0—10°1 и «горячая» полоса 01°0—03°1 основного изотопа C^{12}O_2 . Поглощением полос 00°0—02°1 и 00°0—10°1 изотопа C^{13}O_2 можно пренебречь, так как концентрация этого изотопа в атмосфере составляет 0.00663 г/м³, а концентрация C^{12}O_2 равна 0.616 г/м³. При расчете предполагалось, что линии CO_2 имеют постоянную полуширину, равную 0.07 см⁻¹ [8]. Интенсивности линий P -ветви CO_2 и центры линий рассчитывались по формулам

$$S = \frac{r_{\alpha\nu}}{Q_R \nu_0} \exp \left\{ -\frac{hcF_\nu(J)}{kT} \right\} S(J, l), \quad (1)$$

$$\nu = \nu_0 + \{B_\nu J'(J'+1) - D_\nu J'^2(J'+1)^2\} - \{B_\nu J(J+1) - D_\nu J^2(J+1)^2\}, \quad (2)$$

где α — интегральная интенсивность полосы, $F_\nu(J)$ — вращательная энергия, $S(J, l)$ — сила линии, B_ν , D_ν , B_ν' , D_ν' — вращательные постоянные для нижнего и верхнего колебательных состояний, ν_0 — центр колебательного перехода, Q_R — вращательная статистическая сумма. Необходимые для расчетов по формулам (1) и (2) величины приведены в табл. 1 [9-14].

Кроме того, в исследуемой области была проведена оценка поглощения излучения метаном (CH_4) и закисью азота (N_2O). Параметры линий этих газов приведены в работе [14].