

УДК 621.373

ВОЗМОЖНА ЛИ ГЕНЕРАЦИЯ НА ОТТАЛКИВАТЕЛЬНЫХ ТЕРМАХ ДВУХАТОМНЫХ РАЗЛЕТНЫХ МОЛЕКУЛ?

И. И. Климовский¹, В. А. Щеглов

Обсуждается вопрос о возможности создания лазера на отталкивательных термах двухатомных разлетных молекул. Приведены зависимости коэффициента усиления и электронной температуры, необходимой для достижения генерации, от межъядерного расстояния.

Экимерные лазеры [1 – 3] работают на переходах между двумя термами молекул, нижний из которых является отталкивательным и составлен из атомов в основном состоянии, а верхний (возбужденный) терм имеет потенциальный минимум.

В данной работе приводятся результаты предварительного анализа возможности реализации генерации в электроразрядных газовых лазерах по схеме, представленной на рис. 1. В предлагаемой схеме генерация индуцированного излучения происходит на переходе между отталкивательными термами двухатомной разлетной молекулы. Атомы, образующие разлетную молекулу, могут быть как одинаковыми, так и разными. На рис. 1 схематически отображен случай, когда в образовании разлетной молекулы участвуют различные атомы A и B . Эти атомы в основных состояниях, обозначаемые соответственно символами A_1 и B_1 , соударяясь между собой, образуют разлетную молекулу с отталкивательным термом 1 с потенциальной кривой $U_1(R)$, где R – межъядерное расстояние.

В предлагаемой схеме получения генерации (см. рис. 1) в импульсном или стационарном электрических разрядах электроны возбуждают атомы A_1 из основного состояния, обозначенного цифрой 1, на один из низко расположенных резонансных уровней, обозначенный цифрой 2, с энергией E_2 , образуя возбужденные атомы, обозначаемые символом

¹Институт высоких температур РАН.

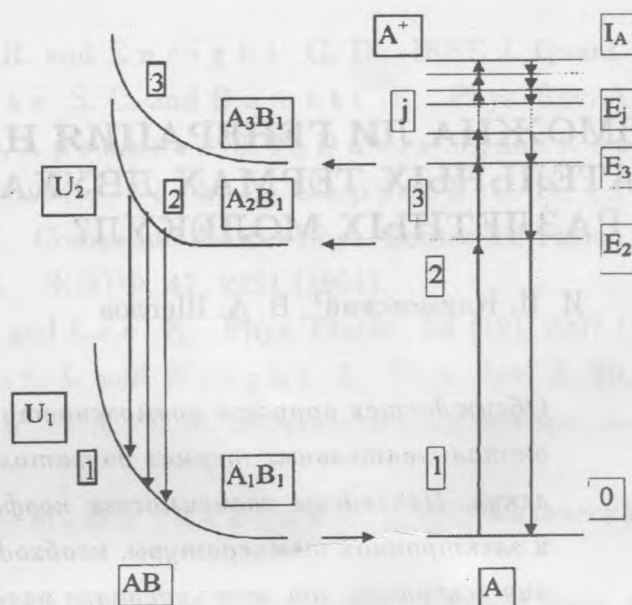


Рис. 1. Схема получения генерации на отталкивательных термах разлетной молекулы.

A_2 . Атомы A_2 в свою очередь либо переводятся электронами в более высоко лежащие состояния с энергиями E_j , где $j = 3, 4 \dots n$, и континуум, либо девозбуждаются электронами в основное состояние. Кроме того, атомы A_2 и B_1 , сталкиваясь, образуют разлетную молекулу A_2B_1 в возбужденном состоянии с отталкивательным термом 2, потенциальная кривая которого $U_2(R)$ отличается от кривой $U_1(R)$ наличием достаточно протяженного плоского участка.

На рис. 2а приведены модельные потенциальные кривые $U_1(R)$ и $U_2(R)$ лазерных отталкивательных термов, построенные соответственно на основе потенциальных кривых термов $X^1 \Sigma_g^+$ и $B^5 \Sigma_u^+$ молекулы Xe_2 в пренебрежении потенциальными ямами на обеих кривых. Именно для этих модельных потенциальных кривых проводился в данной работе анализ возможности получения генерации на отталкивательных термах разлетной молекулы.

В соответствии с [1, 2] концентрации разлетных молекул на термах 1 (N_1) и 2 (N_2) в сферическом слое радиусом R и толщиной δR можно определить как

$$N_1 = n_1 n_B 4\pi R^2 \delta R \cdot e^{-U_1(R)/T_a},$$

$$N_2 = n_2 n_B 4\pi R^2 \delta R \cdot e^{-[U_{1,2}(R) - E_2]/T_a}, \quad (1)$$

где, кроме известных обозначений, n_B – концентрация атомов B в основном состоянии;

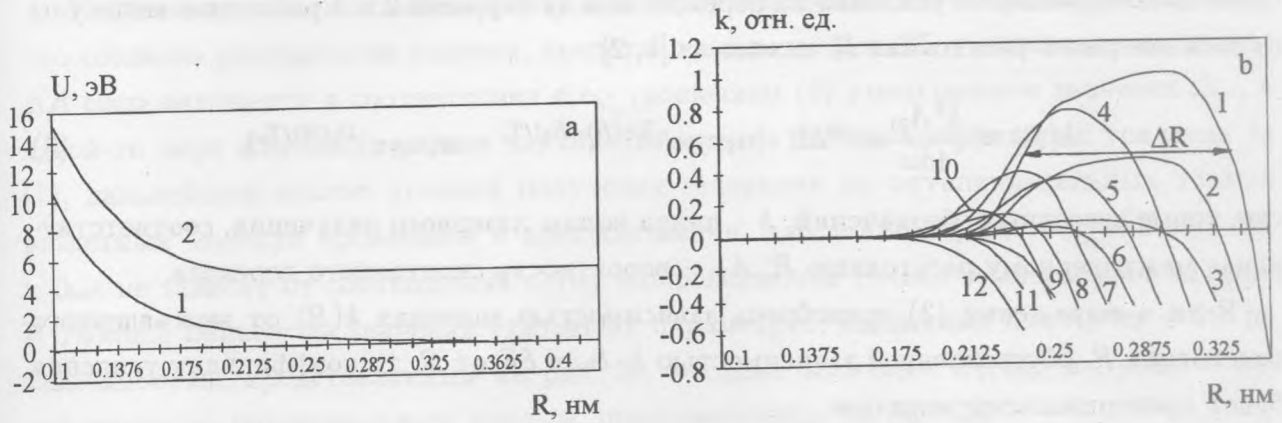


Рис. 2. а) Модельные потенциальные кривые нижнего (1) и верхнего (2) лазерных отталкивательных термов разлетной молекулы. б) Зависимость относительного коэффициента усиления от межъядерного расстояния. $T_a = 0.05$ эВ (1 – 3), 0.1 эВ (4 – 6), 0.2 эВ (7 – 9), 0.3 эВ (10 – 12), $n_2/n_1 = 0.1$ (1, 4, 7, 10), 0.05 (2, 5, 8, 11), 0.01 (3, 7, 9, 12).

n_1, n_2 – соответственно концентрации атомов A в состояниях 1 и 2; T_a – температура атомов в энергетических единицах, $n4\pi R^2 \delta R e^{-U(R)/T_a}$ – вероятность того, что в сферическом слое радиуса R толщиной δR , окружающем атомы A или B , находится соответственно атом B или A .

В [1, 2] δR – размер классически доступной области для ядер молекулы AB . В данной работе параметр δR имеет иной физический смысл, основанный на следующих представлениях. Излучение на переходе между верхним и нижним лазерными термами, происходящее на частоте ω_R , соответствующей определенному межъядерному расстоянию R , имеет определенную ширину $\delta\omega$, обусловленную различными механизмами уширения (доплеровским, ван-дер-ваальсовым и др.). Поэтому в усилении излучения на частоте ω_R будут принимать участие разлетные молекулы, для которых межъядерные расстояния лежат в интервале от $R - \delta R/2$ до $R + \delta R/2$, где значение δR определяется следующим образом:

$$\delta R = h\delta\omega / |dU_1(R)/dR - dU_2(R)/dR|. \quad (2)$$

Для определения условий получения генерации (концентраций атомов A и B , температуры электронов и т.д.) на переходе между отталкивательными термами разлетной молекулы необходимо знать абсолютные населенности 1-го и 2-го лазерных термов N_1 и N_2 , длину волны λ_0 линии генерации, соответствующую центру линии усиления, и спектральную ширину $\delta\omega$ этой линии. Для оценки названных параметров запишем зави-

симось коэффициента усиления на переходе между термами 2 и 1 разлетной молекулы от межъядерного расстояния R , исходя из [1, 2]

$$k(R) \approx \frac{\lambda^2 A_{21}}{4\delta\omega} \pi R^2 \delta R \cdot [n_2 n_B e^{-[U_2(R)-E_2]/T_a} - n_1 n_B e^{-U_1(R)/T_a}], \quad (3)$$

где, кроме известных обозначений, λ – длина волны лазерного излучения, соответствующая межъядерному расстоянию R ; A_{21} – вероятность спонтанного перехода.

Если в выражении (3) пренебречь зависимостью значения $k(R)$ от межъядерного расстояния R , обусловленной зависимостью λ , $\delta\omega$ и δR от R , то коэффициент усиления будет пропорционален величине

$$k(R) \sim K(R) = R^2 e^{-U_1(R)/T_a} \left[\frac{n_2}{n_1} e^{-[U_2(R)-E_2-U_1(R)]/T_a} - 1 \right], \quad (4)$$

позволяющей рассчитать зависимость относительного коэффициента усиления (отношения функции $k(R)$ к ее максимальному значению)

$$k_{rel} = k(R)/k_{max}(R) = K(R)/K_{max}(R) \quad (5)$$

от межъядерного расстояния.

На рис. 2б представлены результаты расчета k_{rel} для модельных потенциальных кривых, представленных на рис. 2а. Необходимо отметить, что нормировка зависимостей $K(R)$ для разных условий расчета производилась на одно и то же значение $K_{max}(R)$, соответствующее значениям $T_a = 0.05$ эВ и $n_2/n_1 = 0.1$.

Для проведения дальнейшего анализа, во-первых, введем два новых параметра, характеризующих кривые, представленные на рис. 2б: параметр $\Delta R = R_{max} - R_{min}$, где R_{max} и R_{min} – большее и меньшее значения межъядерного расстояния, при которых $k_{rel} = 0.5k_{rel,max}$ и параметр R_0 , определяемый как $R_0 = (R_{max} + R_{min})/2$. Видно, что оба параметра ΔR и R_0 достаточно сильно зависят от температуры атомов и сравнительно слабо от отношения концентраций n_2/n_1 . Во-вторых, заменим отношение $\delta R/\delta\omega$ в выражении (3) на отношение $\Delta R/\Delta\omega$, определяя $\Delta\omega$, как

$$\Delta\omega = \frac{1}{h} |[U_2(R_{max}) - U_1(R_{max})] - [U_2(R_{min}) - U_1(R_{min})]|, \quad (6)$$

в результате чего выражение (3) преобразуется к виду

$$k_0 \approx \frac{\lambda_0^2 A_{21}}{4\Delta\omega} \pi R_0^2 \Delta R [n_2 n_B e^{-[U_2(R_0)-E_2]/T_a} - n_1 n_B e^{-U_1(R_0)/T_a}]. \quad (7)$$

Учитывая приближенный характер оценок, проводимых в данной работе, а также то, что согласно результатам расчета, представленным на рис. 2б, уменьшение величины ΔR сопровождается в соответствии с соотношением (6) уменьшением значения $\Delta\omega$, в какой-то мере компенсирующим влияние изменения ΔR на коэффициент усиления k_0 (7), дальнейший анализ условий получения генерации на отталкивательных термах разлетных молекул проводился в предположении, что такие параметры, как R_0 , ΔR и $\Delta\omega$, не зависят от соотношения n_2/n_1 и определяются только температурой атомов. В таблице приведены значения указанных параметров, найденные для $n_2/n_1 = 0.1$ по зависимостям, представленным на рис. 2б, а также величины $U_1(R_0)$ и $U_2(R_0) - E_2$, найденные по потенциальным кривым, представленным на рис. 2а.

Т а б л и ц а

Характерные значения расчетных параметров, при которых реализуется лазерный эффект

$T_a, \text{эВ}$	$R_0, \text{нм}$	$\Delta R, \text{нм}$	$\Delta\omega, \text{с}^{-1}$	$U_1(R_0), \text{эВ}$	$U_2(R_0) - E_2, \text{эВ}$
0.05	0.29	0.09	$7.62 \cdot 10^{13}$	0.28	0
0.1	0.26	0.06	$6.84 \cdot 10^{13}$	0.45	0
0.2	0.24	0.04	$5.53 \cdot 10^{13}$	0.71	0.02
0.3	0.22	0.03	$3.08 \cdot 10^{13}$	0.96	0.12

С учетом данных, приведенных в таблице, необходимая для обеспечения наперед заданного значения k_0 относительная концентрация n_2/n_1 атомов A на втором уровне может быть рассчитана по вытекающему из (7) соотношению

$$\frac{n_2}{n_1} = e^{-\{U_1(R_0) - [U_2(R_0) - E_2]\}/T_a} \left[\frac{4k_0\Delta\omega \cdot e^{U_1(R_0)/T_a}}{\lambda_0^2 A_{21} \pi R_0^2 \Delta R n_1 n_B} + 1 \right]. \quad (8)$$

Затем в предположении, что заселенность уровня 2 атома A находится в равновесии с температурой электронов T_e и что статистические веса уровней 1 и 2 атома A равны между собой, можно рассчитать величину отношения

$$\frac{T_e}{E_2} = 1 / \ln \left(\frac{n_1}{n_2} \right), \quad (9)$$

при которой будет обеспечена заселенность уровня 2 атома A , необходимая для получения генерации на отталкивательных термах (рис. 2а) разлетной молекулы AB .

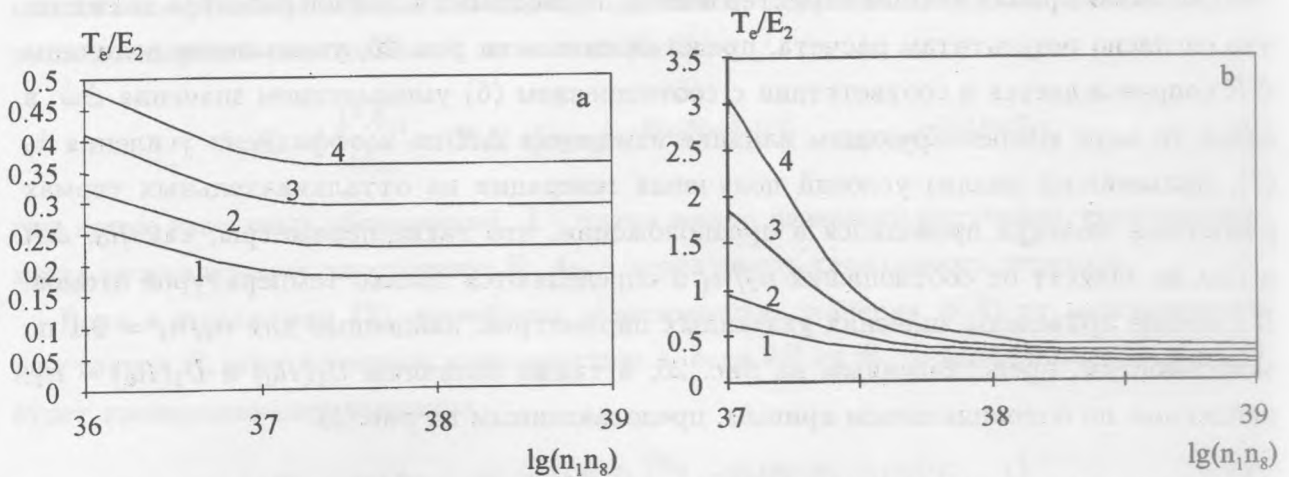


Рис. 3. Зависимости температуры электронов, необходимой для достижения генерации на лазерном переходе между отталкивательными термами разлетной молекулы, от величины $n_1 n_2$. E_2 – энергия возбужденного состояния атома A . а) $\lambda_0 = 250$ нм, $A_{21} = 10^9$ с $^{-1}$, $k_0 = 10^{-3}$ см $^{-1}$; б) $\lambda_0 = 250$ нм, $A_{21} = 10^8$ с $^{-1}$, $k_0 = 10^{-2}$ см $^{-1}$. $T_a = 0.05$ эВ (1), 0.1 эВ (2), 0.2 эВ (3), 0.3 эВ (4).

На рис. 3 представлены результаты расчета отношения T_e/E_2 для двух наборов параметров λ_0 , A_{21} и k_0 и различных концентраций атомов A и B в основном состоянии. Учитывая, что в предлагаемой схеме получения генерации ступенчатые процессы возбуждения высоколежащих уровней атома A и его ионизации должны преобладать над соответствующими прямыми процессами, соотношение T_e/E_2 не должно заметно превышать величину 0.4. Это означает, что, согласно данным, представленным на рис. 3, для переходов в атоме A с вероятностью $A_{21} \approx 10^9$ с $^{-1}$ и длиной волны $\lambda_0 \approx 250$ нм область рабочих температур газа (атомов) простирается примерно до 2000 K, а произведение концентраций атомов $n_A n_B$ лежит в диапазоне от 10^{36} до 10^{39} см $^{-3}$ и выше. С учетом температур атомов приведенный диапазон значений $n_A n_B$ соответствует диапазону давлений примерно от 0.3 до 10 атм и выше. Для переходов в атоме A с вероятностью $A_{21} \approx 10^8$ с $^{-1}$ и длиной волны $\lambda_0 \approx 250$ нм верхняя граница рабочих температур атомов снижается примерно до 1000 K, а нижняя граница рабочего диапазона произведения концентраций атомов $n_A n_B$ поднимается до уровня 10^{38} см $^{-3}$ и, соответственно, нижняя граница давлений поднимается примерно до 3 атм.

В заключение следует отметить, что парами атомов, образующих разлетные молекулы с потенциальными кривыми отталкивательных термов, представляющимися

перспективными для получения генерации на оттачивательных термах, являются пары атомов щелочных металлов и инертных газов (см., например, [4 - 7]).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Елецкий А. В. Экимерные лазеры. УФН, **125**, вып. 2, 279 (1978).
- [2] Елецкий А. В., Смирнов Б. М. Физические процессы в газовых лазерах. М., Энергоатомиздат, 1985.
- [3] Молчанов А. Г. Теория активных сред эксимерных лазеров. Труды ФИАН, **171**, 54 (1986).
- [4] Hedges R. E. M., Drummond D. L., Gallagher A. Phys. Rev. A, **6**, N 4, 1519 (1972).
- [5] Pascale J., Vandeplanque J. J. Chem. Phys., **60**, N 6, 2278 (1974).
- [6] Drummond D. L., Gallagher A. J. Chem. Phys., **60**, N 9, 3426 (1974).
- [7] York G., Scheps R., Gallagher A. J. Chem. Phys., **63**, N 3, 1052 (1975).

Поступила в редакцию 18 июня 1999 г.