

## ЗАСЕЛЕНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ УРОВНЕЙ МОЛЕКУЛ СО В ГАЗОВОМ РАЗРЯДЕ

Н. Н. Соболев, В. В. Соколов, В. Н. Стрелец

Механизм образования инверсной заселенности колебательных уровней двухатомных молекул в газовом разряде, в частности, молекул СО, до сих пор не выяснен. В теоретических работах /1,2/ было показано, что при учете только колебательно-колебательных переходов в случае релаксации ангармонических осцилляторов устанавливается стационарное распределение по колебательным уровням, которое существенно отличается от бальцовановского, причем для высоколежащих уровней имеет место инверсия. Развитие работ /1/ и /2/ для случая лазерной смеси СО- $N_2$  было проведено в /3/. Предполагалось, что накачка СО обеспечивается резонансными переходами энергии между первыми колебательными уровнями молекул СО и  $N_2$ , колебательная температура последних принималась равной 1700°К. Таким образом, в работе /3/ заселенность первого уровня СО фактически задавалась.

В настоящем сообщении рассмотрен механизм образования инверсной заселенности в газоразрядном СО-Не-лазере с учетом ангармоничности молекул СО. Проведено численное решение системы кинетических уравнений для заселенностей 21 уровня СО. Заселенность 21-го уровня принималась равной заселенности 20-го уровня. В отличие от работы /3/, кроме колебательно-колебательных и колебательно-поступательных переходов, в данной работе учтены процессы возбуждения колебательных уровней и диссоциации молекул СО

электронным ударом, радиационные процессы, диффузия молекул к стенкам газоразрядной трубки.

Система кинетических уравнений записывается в следующем виде:

$$\begin{aligned}
 0 = \frac{dn_v}{dt} = & Z(a, a) a \left\{ P_{v+1, v}(a, a) n_{v+1} - [P_{v, v+1}(a, a) + \right. \\
 & \left. + P_{v, v-1}(a, a)] n_v + P_{v-1, v}(a, a) n_{v-1} \right\} + Z(a, a) \times \\
 & \times \left\{ \left( \sum_{v'=1}^{20} P_{v+1, v}^{v'-1, v'}(a, a) \frac{n_{v'-1}}{N} \right) n_{v+1} - \right. \\
 & \left. - \left[ \left( \sum_{v'=1}^{20} P_{v, v+1}^{v', v'-1}(a, a) \frac{n_{v'}}{N} \right) + \left( \sum_{v'=0}^{19} P_{v, v-1}^{v', v'+1}(a, a) \frac{n_{v'}}{N} \right) \right] n_v + \right. \\
 & \left. + \left( \sum_{v'=0}^{19} P_{v-1, v}^{v'+1, v'}(a, a) \frac{n_{v'+1}}{N} \right) n_{v-1} \right\} + Z(a, b) b \times \\
 & \times \left\{ P_{v+1, v}(a, b) n_{v+1} - [P_{v, v+1}(a, b) + P_{v, v-1}(a, b)] n_v + \right. \\
 & \left. + P_{v-1, v}(a, b) n_{v-1} \right\} + A_{v+1, v} n_{v+1} - A_{v, v-1} n_v - \alpha_v \frac{D_v}{\Lambda^2} n_v - \\
 & - k_{d, v} n_v n_e + n_e \left\{ K_{v+1, v} n_{v+1} - [K_{v, v+1} + K_{v, v-1}] n_v + \right. \\
 & \left. + K_{v-1, v} n_{v-1} \right\},
 \end{aligned}$$

где  $Z(a, a)$ ,  $Z(a, b)$  - число газокинетических столкновений молекул CO-CO и CO-He, соответственно;  $P_{v, v'}(a, a)$ ,  $P_{v, v'}(a, b)$  - вероятности колебательно-поступатель-

ных переходов при столкновениях CO-CO и CO-He, соответственно;  $P_{v_1 v_2}^{v_1' v_2'}(a, a)$  - вероятности колебательно-колебательных переходов,  $N$  - полное число частиц

в единице объема  $(N = \sum_{v=0}^{20} n_v; n_v$  - заселенность  $v$ -го

уровня);  $A_{v, v-1}$  - коэффициент Эйнштейна,  $D_v$  - коэффициент диффузии,  $\Lambda = R/2,4$  - диффузионная длина,  $\alpha_v$  - вероятность потери колебательного кванта при столкновении со стенкой,  $K_{d, v}$  - константа скорости диссоциации электронным ударом,  $K_{vv'}$  - константа скорости возбуждения (деактивации) электронным ударом,  $n_e$  - концентрация электронов.

Вероятности колебательно-колебательных и колебательно-поступательных переходов рассчитывались методом Герцфельда /4/, ангармоничность же, в соответствии с работой /5/, учитывалась только путем изменения значения дефекта энергии

$$P_{v+1, v}^{v'-1, v'}(a, a) = \frac{2,17 \cdot 10^{-3}}{1 + 98/T} \frac{(v+1)v'(|v'-v-1|)^{7/3}}{(1 - 0,012v')[1 - 0,012(v+1)]} \times$$

$$\times \frac{1}{T^{1/6}} \exp \left\{ -13,7 \left[ \frac{(v'-v-1)}{T} \right]^{1/3} + \right.$$

$$\left. + \frac{18,8(v'-v-1)}{T} + \frac{88}{T} \right\}; \quad (v \neq v' - 1)$$

$$P_{v+1, v}^{v'-1, v'}(a, a) = \frac{(v')^2 T}{\left(1 + \frac{98}{T}\right) (1 - 0,012v')^2} 2,54 \cdot 10^{-6} \exp \left( \frac{88}{T} \right);$$

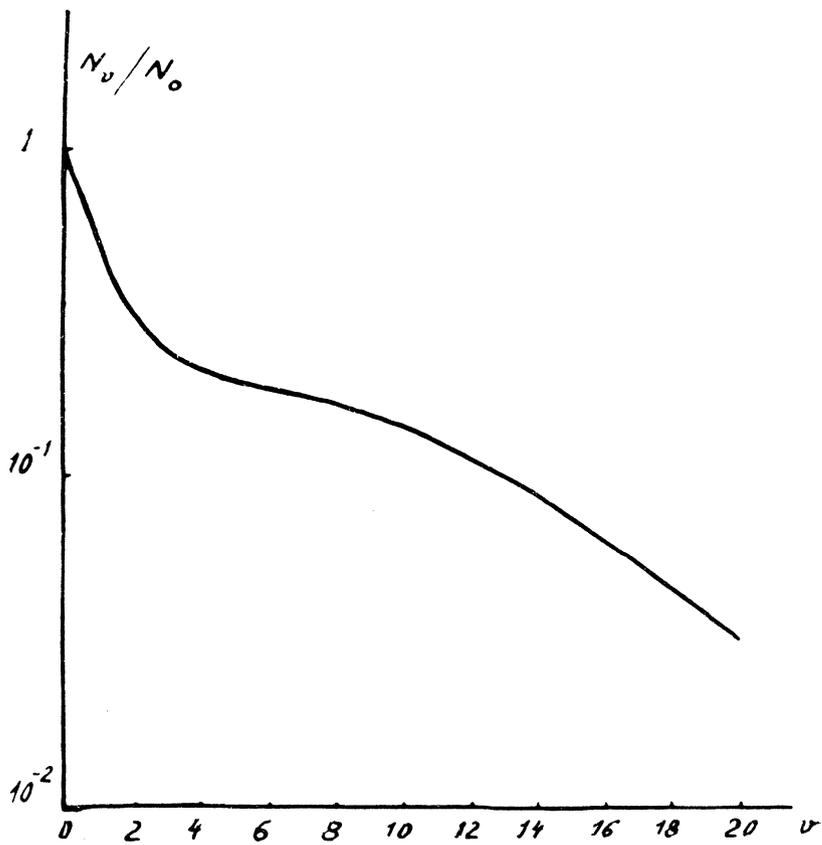
$$(v = v' - 1)$$

$$P_{v+1, v}(a, b) = (v+1) \frac{335}{1 + \frac{33}{T}} \left\{ \frac{[1 - 0,012(v+1)]^2}{T} \right\}^{1/6} \times$$

$$\times \exp \left\{ - 144 \left[ \frac{[1 - 0,012(v + 1)]^2}{T} \right]^{1/3} + \right. \\ \left. + \frac{1560[1 - 0,012(n + 1)]}{T} + \frac{30}{T} \right\},$$

где  $T$  – газовая температура. Значения остальных констант ( $A_{v,v-1}$ ;  $D_v$ ;  $K_{d,v}$ ;  $K_{v,v'}$ ) взяты из работ /6–9/. Концентрация электронов принята равной  $5 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$  /10/, газовая температура  $200^\circ\text{K}$ , полное давление  $p = 10$  тор ( $p_a : p_b = 1:4$ ), радиус трубки 1 см.

Из рисунка 1, на котором приведены результаты расчетов, можно видеть, что распределение заселенностей значительно отличается от бoльцмановского. Заселенности уровней от 5 до 10 соответствуют более высокой “колебательной температуре” ( $T = 37800^\circ\text{K}$ ), чем заселенности первых трех уровней ( $T = 5250^\circ\text{K}$ ). Заметим, что указанный небoльцмановский вид распределения оказался мало зависящим от типа накачки. В частности, была рассмотрена  $\delta$ -образная накачка на первый уровень, а также накачка с постоянными  $K_{vv'}$  для всех уровней. Полученный результат – независимость вида распределений от типа накачки – связан по-видимому, с тем, что скорость возбуждения за счет электронных столкновений существенно меньше скоростей обмена квантами между молекулами при столкновениях. Напомним, что в случае модели гармонических осцилляторов для молекул должно существовать бoльцмановское распределение по уровням. Экспериментальные измерения заселенностей колебательных уровней CO в газовом разряде на смеси CO–He нам не известны. Укажем для сравнения, что согласно измерениям Легей /13/ в смеси CO–N<sub>2</sub>, заселенности первых пяти уровней CO описываются колебательной температурой  $3200^\circ\text{K}$ , 6–8 уровней – треновским распределением, а заселенности уровней выше 9 – колебательной температурой  $15000^\circ\text{K}$ . Согласно оценкам Осгуда и др. /12/, в смеси CO–воздух–He колебательная температура,



Р и с. 1. Зависимость относительных заселенностей колебательных уровней СО от номера уровня.

описывающая заселенности шестого и седьмого уровней, равна  $8500^{\circ}\text{K}$ . Таким образом, значения "колебательных температур", полученные в настоящей работе, представляются довольно высокими. Это может быть вызвано использованием недостаточно надежных сечений электронно-молекулярных столкновений. Кроме того, использование герцфельдовских формул для вероятностей колебательных переходов в области низких температур также проблематично и вызвано только отсутствием каких-либо других сведений. И, наконец, для непосредственного сравнения полученных значений колебательных температур со значениями, реализующимися в лазерных условиях, необходимо знать точно химический состав и температуру рабочего газа. Весьма вероятно, что средняя температура газа отличается от величины  $175^{\circ}\text{K}$ , использованной для оценок колебательных температур в /12/. Несмотря на все это, результаты настоящей работы позволяют сделать вывод о набольцмановском заселении колебательных уровней молекул  $\text{CO}$  в газовом разряде. Заметим, что в связи с отсутствием инверсии заселенностей колебательных уровней генерация на линиях В-ветви невозможна /13/. Наблюдаемые же экспериментально лазерные переходы на Р-ветви соответствуют большим значениям колебательных температур, при которых возможна частичная инверсия колебательно-вращательных уровней.

Поступила в редакцию  
24 мая 1971 г.

#### Л и т е р а т у р а

1. С. Е. Treanor, J. W. Rich, R. G. Rehm. J. Chem. Phys., 48, 1798 (1968).
2. К. Н. С. Bray, J. Physics, 1B, 705 (1968).
3. С. А. Brau, С. Е. Caledonia, R. E. Center. J. Chem. Phys., 52, 4306 (1970).
4. К. F. Herzfeld, T. A. Litovitz, Absorption and Dis-

ersion of Ultrasonic Waves, Academic Press, N. Y., 1959.

5. Н. Н. Соболев, В. В. Соковиков. Электронная техника, серия 3, вып. 4 (20), стр. 3 (1970).
6. J. K. Cashion. J. Mol. Spectroscopy, 10, 182 (1963).
7. Дж. Гиршфельдер, К. Кертисс, Р. Берд. Молекулярная теория газов и жидкостей, ИЛ., М., 1961 г.
8. А. И. Максимов и др. ХВЭ, 4, 543 (1970).
9. G. J. Schulz. Phys. Rev., 135A, 988 (1954).
10. М. З. Новгородов, А. Г. Свиридов, Н. Н. Соболев. Препринт ФИАН (в печати).
11. F. Legay, N. Legay-Sommaire, G. Taieb. Canad. J. Phys., 48, 1949 (1970).
12. R. M. Osgood, Jr., E. R. Nichols, W. C. Eppers, Jr., R. D. Petty. Appl. Phys. Letts., 15, 69 (1969).
13. C. K. N. Patel. Phys. Rev., 141, 71 (1966).