

В. А. Агафонов

## ЧАСТИЧНАЯ ИНВЕРСИЯ НАСЕЛЕННОСТИ НА ЭЛЕКТРОННЫХ УРОВНЯХ ДВУХАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ ПРИ РЕЗОНАНСНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ ИНФРАКРАСНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Найден простой способ оценки частичной инверсии населенности на электронных уровнях двухатомных молекул в условиях резонансного воздействия ИК-излучения на колебательные переходы.

Получение инверсии населенности на электронных уровнях молекул — центральный вопрос при генерации излучения видимого диапазона длин волн в газах. Инверсия достигается, как правило, посредством электрического разряда. Возможность создания ее в процессе химических реакций рассматривалась во многих работах (например, в [1—3]). При этом анализировались химические реакции, продуктами которых являются электронно-возбужденные молекулы BaO, MgO, HF, IF.

Существование частичной инверсии населенности определяется эволюцией функций распределения молекул по колебательным уровням верхнего и нижнего электронных состояний. Динамика изменения этих функций распределения зависит от скоростей  $V-V$ - и  $V-T$ -процессов релаксации, излучательного распада верхнего электронного состояния, образования электронно-возбужденных молекул и их распределений по колебательным уровням в элементарном акте процесса возбуждения, например в элементарном акте химической реакции.

Рассмотрим реакцию  $Ba + N_2O \rightleftharpoons BaO + N_2$  в аргоне, считавшуюся перспективной для получения генерации в видимом диапазоне длин волн. Функции распределения молекул BaO по колебательным уровням электронных состояний  $A^1\Sigma$  и  $X^1\Sigma$  найдены в результате спектрального исследования пламени в [4]. Анализ результатов [5] показал, что в элементарном акте реакции около 20 % молекул образуется в состоянии  $A^1\Sigma$ . При этом около 35 % молекул от числа находящихся в верхнем электронном состоянии расположено на колебательном уровне  $v' = 1$ . При низких давлениях аргона (менее 4666 Па) максимумы функции распределения наблюдались на уровнях  $v' = 1, 3, 7$ . Этот факт трактовался как результат колебательного обмена между близкорасположенными колебательными уровнями электронных состояний  $A^1\Sigma$  и  $a^3\Pi$  и релаксации колебательной энергии этих состояний. При увеличении давления аргона функция распределения приближается к равновесной с колебательной температурой  $\sim 900$  К. Значения факторов Франка — Кондона и  $r$ -центроид [6] позволяют рассчитать радиационное время жизни состояния  $A^1\Sigma$  и вероятности переходов между отдельными колебательными уровнями. Наибольшие значения эти вероятности имеют для следующих колебательных уровней из числа тех, для которых можно ожидать существования инверсии населенности:  $v' = 1 \rightarrow v'' = 6, 7, 8$ ,  $v' = 3 \rightarrow v'' = 11, 12$ ,  $v' = 7 \rightarrow v'' = 19$ ,  $v' = 8 \rightarrow v'' = 20$ . Радиационные времена жизни колебательных уровней верхнего электронного состояния составляют  $\sim 10^{-7}$  с. Характерные времена  $V-V$ - и  $V-T$ -процессов релаксации таковы, что время существования частичной инверсии незначительно. Это не позволяет повысить давление активной среды для получения приемлемого коэффициента усиления.

При резонансном воздействии ИК-излучения на колебательные уровни верхнего электронного состояния появляется процесс, успешно конкурирующий с процессами колебательной релаксации. Характерное радиационное кинетическое время его для молекулы с дипольным моментом  $d$  в поле с напряженностью  $\epsilon$  определяется выражением  $\tau = \hbar/d\epsilon$ . Для молекулы BaO в поле с напряженностью  $10^4$  В/м оно равно  $\sim 10^{-8}$  с. Такой процесс эффективно влияет на функцию распределения молекул по колебательным уровням. Его анализ приведен в [7], где показано, что

радиационное заселение нескольких нижних колебательных уровней приводит к заселению верхних за счет процесса колебательной релаксации, сохраняющего запас колебательных квантов в системе неизменным. Кроме того, интенсивное поле ИК-излучения, уширяющее линии, будет воздействовать и на колебательные уровни долгоживущего электронного состояния  $a^3\Pi$ , что приведет к заселению его верхних колебательных уровней и передаче энергии на уровни состояния  $A^1\Sigma$ . Таким образом, появляется возможность увеличить время существования инверсии населенности для уровней с колебательными квантовыми числами  $v' = 7 \rightarrow v'' = 19$  и  $v' = 8 \rightarrow v'' = 20$ , когда колебательная релаксация приводит к исчезновению инверсии для уровней  $v' = 1 \rightarrow v'' = 6, 7, 8$  и  $v' = 3 \rightarrow v'' = 11, 12$ .

Попытаемся найти способ приближенной оценки частичной инверсии населенности на электронных уровнях двухатомных молекул в условиях резонансного воздействия ИК-излучения. Рассмотрим систему двухатомных молекул, моделируемых ангармоническим осциллятором, взаимодействующих с полем инфракрасного излучения. Будем полагать, что эта система имеет неравновесное распределение по электронным состояниям, два из которых оптически связаны между собой электродипольными переходами. Излучение резонансно воздействует на населенности колебательных уровней только верхнего электронного состояния. Причем в процессе воздействия излучения распределение по электронным состояниям не успевает существенно измениться. Попытаемся найти возможность оценки частичной инверсии населенности между колебательными уровнями оптически связанных электронных состояний.

Для этого воспользуемся методикой, разработанной в [8]. Уравнение баланса населенностей  $N_v$  колебательных уровней  $v$  верхнего электронного состояния имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{dN_v}{dt} = & \frac{1}{N} \sum_m (Q_{v+1,v}^{m,m+1} N_m N_{v+1} - Q_{v,v+1}^{m+1,m} N_{m+1} N_v) - \\ & - \frac{1}{N} \sum_m (Q_{v,v-1} N_m N_v - Q_{v-1,v}^{m+1,m} N_{m+1} N_{v-1}) + \\ & + (P_{v+1,v} N_{v+1} - P_{v,v+1} N_v) - (P_{v,v-1} N_v - P_{v-1,v} N_{v-1}) + \\ & + I_{v-1,v} (N_{v-1} - N_v) - I_{v,v+1} (N_v - N_{v+1}) + A_{v+1,v} N_{v+1} - A_{v,v-1} N_v, \end{aligned}$$

где  $N$  — плотность молекул;  $Q_{i,j}^{p,q}$  — вероятность колебательно-колебательного обмена, когда в результате столкновения молекул, находящихся на уровнях  $p$  и  $i$ , происходит переход на уровни  $q$  и  $j$ ;  $P_{i,j}$  и  $A_{i,j}$  — вероятности столкновительного и спонтанного радиационного перехода  $i \rightarrow j$ ;  $I_{i,j}$  — вероятность индуцированного радиационного перехода  $i \rightarrow j$ .

Суммируя левую и правую части по  $v$  от 0 до  $i$ , получим

$$(1) \quad \sum_{v=0}^i \frac{dN_v}{dt} = \frac{1}{N} (Q_{i+1,i}^{m,m+1} N_m N_{i+1} - Q_{i,i+1}^{m+1,m} N_{m+1} N_i) + \\ + P_{i+1,i} N_{i+1} - P_{i,i+1} N_i - I_{i,i+1} (N_i - N_{i+1}) + A_{i+1,i} N_{i+1}.$$

Вероятности прямых и обратных переходов связаны соотношениями

$$\begin{aligned} Q_{i,i+1}^{m+1,m} &= Q_{i+1,i}^{m,m+1} \exp\{-2\Delta E(m-i)/T\}, \quad P_{i,i+1} = \\ &= P_{i+1,i} \exp\{-(E_1 - 2\Delta E_i)/T\}, \quad I_{i,i+1} = I_{i+1,i}. \end{aligned}$$

Здесь  $T$  — температура газа;  $E_1$  и  $\Delta E$  — величины соответственно нижнего колебательного кванта верхнего электронного состояния и его ангармоничности. В дальнейшем, как и в [8], считаем, что  $T \ll E_1$ ,  $E_1 - 2\Delta E_i \gg T$ ,  $2\Delta E_i |m-i| \ll T$ . Тогда, если населенности медленно меняются в зависимости от номера уровня, членом  $P_{i,i+1} N_i$  в (1) можно пренебречь.

Перейдем к диффузионному приближению, введя непрерывную колебательную функцию распределения  $f(i)$  такую, что  $N_i = Nf(i)$ ,  $N_{i+1} = Nf(i)[1 + d \ln f(i)/di]$ . Заменяя суммирование на интегрирование и рассматривая квазистационарный режим ( $dN_v/dt = 0$ ), имеем

$$(2) \quad \int Q_{i+1,i}^{m,m+1} f(m) \left[ \frac{d \ln f(i)}{di} - \frac{d \ln f(m)}{dm} - \frac{2\Delta E}{T}(m-i) \right] dm + P_{i+1,i} + A_{i+1,i} + I_{i,i+1} \frac{d \ln f(i)}{di} = 0.$$

Воспользуемся соотношениями

$$Q_{i+1,i}^{m,m+1} \approx Q_{10}(i+1)(m+1)e^{-\delta_{VV}(i-m)}(3/2 - (1/2)e^{-\delta_{VV}(i-m)}),$$

$$P_{i+1,i} \approx P_{1,0}e^{\delta_{VT}i}, \quad A_{i+1,i} \approx A_{1,0}(i+1), \quad \delta_{VV} = (0,427/\alpha) \sqrt{\mu/T} \Delta E,$$

где  $\mu$  — приведенная масса сталкивающихся частиц;  $\alpha$  — постоянная в экспоненциальном потенциале межмолекулярного взаимодействия. Кроме того, будем полагать, что для высоковозбужденных молекул главными из  $V-V$ -процессов являются столкновения с молекулами на нижних колебательных уровнях верхнего электронного состояния [8]. При этом основной вклад в интеграл (2) будут давать члены с малым  $m$ . Поэтому вместо  $f(m)$  можно подставить триноровскую функцию распределения

$$(3) \quad f_{Tr} = f_0 \exp \{ -i(E_1/T_1 - \Delta E(i-1)/T) \}, \quad T_1 = E_1/\ln(f_0/f_1).$$

Тогда (2) после подстановки (3) и приближенного интегрирования примет вид

$$(4) \quad \frac{1}{f} \frac{df}{di} \left( -Q_{1,0} e^{-\delta_{VV}i} \frac{3}{2} f_0 \frac{1}{\left( \frac{E_1}{T_1} - \delta_{VV} \right)^2} - \frac{I_{i,i+1}}{(i+1)} \right) \approx$$

$$\approx Q_{1,0} e^{-\delta_{VV}i} \frac{3}{2} f_0 \frac{1}{\left( \frac{E_1}{T_1} - \delta_{VV} \right)^2} \left( \frac{E_1}{T_1} - \frac{2\Delta E_i}{T} + \frac{\Delta E}{T} \right) + P_{1,0} e^{\delta_{VT}i} + A_{1,0}.$$

Рассмотрим случай, когда первым слагаемым в левой части (4) можно пренебречь по сравнению со вторым, а форма спектральной линии воздействующего излучения такова, что

$$(5) \quad I_{i,i+1} = y_1(i+1)e^{-y_2i}$$

( $y_1, y_2$  — параметры). Тогда уравнение (4) имеет решение

$$(6) \quad f(i) = f_0 \exp \left\{ \frac{3}{2} \frac{(\bar{E}_1 - \Delta \bar{E})}{y_1 T} Q_{1,0} \frac{f_0}{\left( \frac{E_1}{T_1} - \delta_{VV} \right)^2} \left[ \frac{(e^{(y_2 - \delta_{VV}i)} - 1)}{y_2 - \delta_{VV}} \frac{E_1 - \Delta E}{T} + \right. \right.$$

$$\left. \left. + \frac{2\Delta E}{T} \frac{(e^{(y_2 - \delta_{VV}i)} - 1)}{(y_2 - \delta_{VV})^2} ((y_2 - \delta_{VV})i - 1) \right] - \right.$$

$$\left. - \frac{P_{1,0}(e^{(y_2 + \delta_{VT}i)} - 1)}{y_1(y_2 + \delta_{VT})} - \frac{A_{1,0}(e^{y_2i} - 1)}{y_1 y_2} \right\}.$$

Выражение (6) справедливо, когда скорость  $V-V$ -обмена мала по сравнению со скоростью индуцированных переходов.

В случае, когда в (1) можно пренебречь членами, содержащими  $Q$ , т. е. пренебречь процессами  $V-V$ -обмена по сравнению с процессами столкновительной релаксации и спонтанного излучения, выражение (2) примет вид

$$0 = P_{1,0}(i+1)e^{\delta_{VT}i} + A_{1,0}(i+1) + I_{i,i+1} \frac{d \ln f(i)}{di}.$$

Учитывая (5), получим

$$\frac{1}{f} \frac{df(i)}{di} = -\frac{\tilde{P}_{1,0}}{y_1} e^{(\delta_{VT} + y_2)i} - \frac{A_{1,0}}{y_1} e^{y_2 i}.$$

Откуда

$$f(i) = f_0 \exp \left[ -\frac{P_{1,0} (e^{(\delta_{VT} + y_2)i} - 1)}{y_1 (\delta_{VT} + y_2)} - \frac{A_{1,0} (e^{y_2 i} - 1)}{y_1 y_2} \right].$$

Такое же решение найдем из (6), если положить  $Q_{1,0} = 0$ .

Для определения населенностей колебательных уровней нижнего электронного состояния можно воспользоваться решением из [8]. Знание функций распределения молекул по колебательным уровням верхнего и нижнего электронных состояний и вероятностей образования молекул в этих состояниях в элементарном акте возбуждения позволяет оценить частичную инверсию населенности на этих электронных состояниях. Определение изменения во времени частичной инверсии населенности требует детального анализа кинетических уровней всей совокупности физических процессов.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Башкин А. С., Куприянов Н. Л., Ораевский А. Н. О химических лазерах видимого диапазона // Квантовая электроника.— 1978.— Т. 5, № 12.
2. Heberlin J. M., Cohen N. Help: A model for evaluating the feasibility of using various chemical reaction as electronic lasers // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.— 1975.— V. 15, N 9.
3. Qi Z., Ruiping H., Fengting S. et al. Studies of visible chemical lasers. I. Electronic transition IF chemical laser // Chinese Physics-Lasers.— 1988.— V. 15, N 1.
4. Jones C. R., Broida H. P. Gas-phase reaction of Ba with N<sub>2</sub>O. I. Measurement of production efficiency of excited states // J. Chem. Phys.— 1974.— V. 60, N 11.
5. Fild R. W., Jones C. R., Broida H. P. Gas-phase reaction of Ba with N<sub>2</sub>O. II. Mechanism of reaction // J. Chem. Phys.— 1974.— V. 60, N 11.
6. Wentink T., Robert J., Spindle J. Franck — Condon factors, r-centroids and oscillator strength of BaO // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.— 1972.— V. 12, N 2.
7. Ораевский А. Н., Савва В. А. Возбуждение колебаний молекулы лазером и химические реакции // Краткие сообщения по физике.— 1970.— № 7.
8. Гордиец Б. Ф., Мамедов Ш. С. Функция распределения и скорость релаксации колебательной энергии в системе ангармонических осцилляторов // ПМТФ.— 1974.— № 3.

г. Москва

Поступила 15/V 1990 г.

УДК 538.24.42

С. А. Калихман

### ПРЕДЕЛЬНЫЕ РЕЖИМЫ УСКОРЕНИЯ ПРОВОДНИКОВ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМИ СИЛАМИ

Ускорение проводников электромагнитными силами — процесс, используемый для исследования высокоскоростных соударений [1, 2]. Если нагрев метаемого тела рассмотрен достаточно подробно [3, 4], то механические деформации и напряжения в проводнике в процессе разгона изучены недостаточно. Вместе с тем ясно, что деформация проводника может не только исказить картину высокоскоростного взаимодействия, но и привести к развалу его на отдельные фрагменты, ориентированные хаотически, ускорение которых уже невозможно. Цель данной работы — изучение предельных режимов ускорения с точки зрения допустимых деформаций и выбор параметров, обеспечивающих достижение наибольшей скорости.

Рассмотрим движение в направлении оси  $OZ$ , перпендикулярной оси проводящего упругого стержня длиной  $l$ , массой на единицу длины  $m$ , под действием распределенной вдоль стержня электромагнитной нагрузки  $F(y, t) = (B + Ay)^2 \sin^2 \omega t$ ,  $y \in [0, 5l; -0, 5l]$ ,  $A, B$  — постоянные.