

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВЕРОЯТНОСТЕЙ СПОНТАННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ И КОЭФФИЦИЕНТОВ СТОЛКНОВИТЕЛЬНОГО УШИРЕНИЯ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ МОЛЕКУЛЫ CO₂

О. Н. Крапивная¹, К. И. Аршинов¹, В. В. Невдах²

¹Институт технической акустики НАН Беларуси, Витебск

²Белорусский национальный технический университет, Минск

E-mail: itaaki@yandex.ru

Для расчета задач переноса теплового излучения в атмосфере и характеристик CO₂-лазеров требуется знание таких спектральных параметров молекулы CO₂ как вероятность спонтанного излучения A_J и коэффициента столкновительного уширения γ_J J -й спектральной линии молекулы CO₂. Однако даже для наиболее изученной линии $P(20)$ перехода $10^0 0-00^0 1$ молекулы CO₂ значения приводимых в литературе параметров превышают погрешности измерений. Так значения A лежат в диапазоне $0.1 \div 0.32 \text{ с}^{-1}$, а значения параметра γ в диапазоне $6.51 \div 10.34 \text{ МГц/Тор}$. Сложившееся положение дел предполагает как проведение анализа существующих методик определения данных параметров, так и поиск новых.

Для одновременного определения вероятности спонтанного излучения A_J и коэффициента столкновительного уширения γ_J J -й спектральной линии молекулы CO₂ используется измеренная на центральной частоте зависимость ненасыщенного коэффициента поглощения (КП) от давления. Спектральный КП в центре линии при давлении углекислого газа p_i может быть выражен (полное выражение КП см., например, в [1])

$$\alpha_i(\nu_{0J}) = S_{iJ} \cdot F_i(\nu_{0J}), \quad (1)$$

где ν_{0J} – частота, соответствующая центру J -й линии; $S_{iJ} = A_J \cdot \phi_{iJ}$ – сила J -й линии; ϕ_{iJ} – рассчитываемая функция установленного вида [1]; $F_i(\nu_{0J})$ – форм-фактор в центре J -й линии. В рассматриваемом диапазоне давлений (5-30 Тор) уширение линии поглощения определяется как столкновениями, так и эффектом Доплера, т.е. форма линии поглощения имеет контур Фойгта. Наиболее простое и достаточно точное (модуль относительной ошибки $\delta < 0.9 \%$) аналитическое выражение для фойгтовского форм-фактора в центре линии имеет вид [2]

$$F(\nu_{0J}) = 1 / \left[\Delta\nu_c + \sqrt{\left(\frac{\pi-2}{2} \right)^2 (\Delta\nu_c)^2 + \frac{\pi}{4\ln(2)} (\Delta\nu_D)^2} \right], \quad (2)$$

где $\Delta\nu_c = \gamma \cdot p_{\text{CO}_2}$, $\Delta\nu_D = \frac{2\nu_0}{c} \sqrt{\frac{2\ln(2)kT}{M}}$ – столкновительная и доплеровская ширины J -й линии. Таким образом, распределению КП от давления

соответствует система уравнений вида (1) линейных относительно вероятности спонтанного излучения A_J и нелинейных относительно коэффициента столкновительного уширения γ_J . Для решения данной системы уравнений необходимо минимизировать относительно искомых параметров $\{A_J, \gamma_J\}$ совокупность квадратов отклонений измеренных коэффициентов поглощения $\hat{\alpha}_{iJ}$ от рассчитанных коэффициентов поглощения $\alpha_{iJ}(A_J; \gamma_J)$

$$Z_J = \sum_{i=1}^n [\hat{\alpha}_{iJ} - \alpha_{iJ}(A_J; \gamma_J)]^2, \quad (3)$$

путем численного сканирования γ_J с последующим расчетом A_J из выражения

$$A_J = \frac{\sum_i \hat{\alpha}_i \varphi_i F_i(\nu_{0J})}{\sum_i [\varphi_i F_i(\nu_{0J})]^2}. \quad (4)$$

На рис. 1 представлена зависимость КП от давления для линии R(22) перехода $10^0 0-00^0 1$ молекулы CO_2 измеренная при температуре 300 К. Используя экспериментальные данные представленные на рис.1, проведен расчет искомых параметров $\{A, \gamma\}$ по описанной методике: $A = 0.195 \pm 0.009 \text{ с}^{-1}$, $\gamma = 7.53 \pm 0.38 \text{ МГц/Тор}$. Погрешности искомых параметров определялись путем расчета ковариационных матриц [3]. Полученные значения искомых параметров ложатся в известные из литературы диапазоны A_J и γ_J , что можно рассматривать, как подтверждение надежности методики их определения.

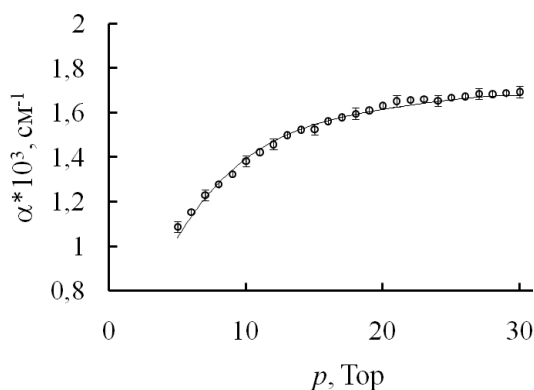


Рис.1. Зависимость коэффициента поглощения от давления для линии R(22) перехода $10^0 0-00^0 1$ молекулы CO_2 при температуре 300 К: $\circ$ – эксперимент; сплошная линия – расчет КП для $A=0.195 \text{ с}^{-1}$ и $\gamma=7.53 \text{ МГц/Тор}$

1. Аршинов К. И., Аршинов М. К., Невдах В. В. // Оптика и спектроскопия. 2012. Т. 112. № 6. С. 914–919.
2. Кудря В. П. // Оптика и спектроскопия. 1983. Т. 55. № 5. С. 1113–1115.
3. Лешенюк Н. С., Пашкевич В. В. // ЖПС. 1987. Т. 46. № 4. С. 567–572.