

РАСЧЕТ МОЛЕКУЛЯРНОГО ГЕНЕРАТОРА НА ПУЧКЕ МОЛЕКУЛ ND_3

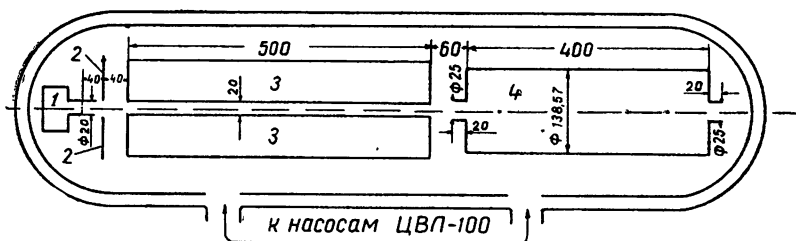
Н. Г. Басов, К. К. Свидзинский

Исследуется вопрос о возможности создания молекулярного генератора с использованием инверсионных переходов в пучке молекул тяжелого аммиака (ND_3). Показана возможность создания такого генератора и приведен расчет основных его параметров.

Настоящая работа посвящена расчету молекулярного генератора, работающего на инверсионном переходе пучка молекул полностью дейтерированного аммиака (ND_3). Такой генератор должен обладать достаточно высокой абсолютной стабильностью частоты ($\sim 10^{-9}$) при мощности $\sim 10^{-11}$ *вт*.

В отличие от молекулярного генератора на пучке NH_3 [1, 2] генератор на дейтерированном аммиаке будет работать в более удобном для преобразования частоты и усиления дециметровом диапазоне ($\lambda \sim 18$ *см*), и применение его в качестве источника высокостабильных колебаний позволит, по-видимому, существенно упростить схему эталона частоты (времени).

Кроме того, как и в случае обычного аммиака [2, 3], молекулярный генератор можно использовать в качестве спектроскопа с очень высоким разрешением (порядка нескольких сот *гц*) для изучения сверхтонкой структуры инверсионного спектра ND_3 . Теоретический анализ сверхтонких взаимодействий в молекуле ND_3 может быть проведен на основании теории сверхтонкой структуры спектра молекулы NH_3 [4].



Принципиальная схема молекулярного генератора на пучке ND_3 :

1 — источник пучка, 2 — холодная диафрагма, 3 — стержни квадрупольного конденсатора, 4 — резонатор.

Для получения пучка активных молекул ND_3 , как в случае NH_3 , применим метод сортировки с помощью квадрупольного конденсатора [5]. Поэтому молекулярный генератор на ND_3 может быть построен и рассчитан по схеме молекулярного генератора на NH_3 [1]. Принципиальная схема такого генератора с указанием основных размеров изображена на рис. 1.

Полностью дейтерированный аммиак имеет достаточно интенсивный инверсионный спектр, расположенный в диапазоне $1600 \div 2000$ *мгц* [6]. Одна из наиболее интенсивных линий этого спектра $J=6, K=6$ имеет частоту $\nu_{66} = 1656,18$ *мгц* ($\lambda_{66} = 18,1139$ *см*) [6], где

J — полный вращательный момент молекулы, K — проекция J на ось симметрии молекулы. Цилиндрический резонатор для возбуждения колебания типа E_{001} , настроенный на эту частоту ($R_{\text{рез}}=6,927 \text{ см}$), при пропускании молекулярного пучка вдоль его оси обеспечивает минимальное доплеровское уширение линии [7].

Стабильность и условия самовозбуждения молекулярного генератора улучшаются при увеличении длины резонатора до тех пор, пока пролетная ширина линии превосходит доплеровскую. При длине резонатора $l=40 \text{ см}$ пролетная ширина линии $\Delta\nu_\tau=\frac{1}{\tau}=1,25 \text{ кгц}$ еще, по-видимому, превышает доплеровскую ширину. Здесь $\tau=l/\bar{v}$ — среднее время пролета молекул через резонатор, $\bar{v}=5 \cdot 10^4 \text{ см/сек}$ — средняя скорость молекул в пучке.

Максимальный поток молекул в пучке, который можно получить от печи с решеткой радиуса R_n , равен [1]

$$N_n = \frac{\pi \bar{v} R_n}{4 \sqrt{2} \sigma} = 0,46 \cdot 10^{19} R_n \frac{\text{мол}}{\text{сек}},$$

где σ — поперечное сечение соударений молекулы ND_3 , равное $9,9 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$ [8].

Среди этих молекул в состоянии $J=6, K=6$ на верхнем инверсионном уровне находится

$$N_{JKM_J} = 0,48 \cdot 10^{16} R_n \frac{\text{мол}}{\text{сек}},$$

где M_J — проекция момента J на направление электрического поля в квадрупольном конденсаторе. При вычислении N_{JKM_J} были использованы следующие численные значения параметров молекулы ND_3 [9]: вращательные постоянные $A=3,15 \text{ см}^{-1}$, $B=5,138 \text{ см}^{-1}$; вращательная статистическая сумма с учетом инверсионного удвоения $Q=1,184 \cdot 10^3$; ядерный статистический вес $g_J(K=6)=\frac{11}{9}$; вращательный статистический вес $g_J(y=6, K=6)=2$.

Число молекул, отсортированных квадрупольным конденсатором, равно

$$(N_{JKM_J})_{\text{сорт}} = N_{JKM_J} \frac{W_m}{kT} \quad (W_m \ll kT), \quad (1)$$

где W_m — максимальное смещение инверсионного уровня молекулы в поле квадрупольного конденсатора, kT — средняя кинетическая энергия молекулы в пучке. Энергия штарковского взаимодействия молекулы

$$V_{\text{шт}} = Ed_0 \frac{KM_J}{J(J+1)},$$

где $d_0=1,5 \text{ деб}$ — дипольный момент молекулы ND_3 [10], E — напряженность электрического поля в квадрупольном конденсаторе. В случае, когда $V_{\text{шт}}$ мало по сравнению с вращательной энергией молекулы, можно написать [8]

$$W_m = \delta \sqrt{1 + a^2} - 1, \quad (2)$$

где 2δ — энергия инверсионного расщепления уровней молекулы, а $a = \frac{V_{\text{шт}}}{\delta}$. Поскольку величина δ у ND_3 примерно в 16 раз меньше, чем у NH_3 , то, согласно (1) и (2), для получения достаточно большого числа активных молекул в случае ND_3 приходится пользоваться „сильными“ полями, при которых $V_{\text{шт}}$ сравнимо с $W_{\text{инв}}$, т. е. когда условие $a \ll 1$ (которое было выполнено в случае NH_3

(„слабые поля“) [1]) более не выполняется. На квадрупольный конденсатор с радиусом $R = 1$ см можно, по-видимому, подавать разность потенциалов U до 100 кВ (в работе [1] $R = 0,3$ см, $U \approx 40$ кВ) и создавать максимальную напряженность поля $E_m = U/R = 100$ кВ/см.

Мы проведем расчет генератора для $U = 100, 60$ и 40 кВ, которым соответствуют значения параметра a

$$a(U) = \frac{E_m d_0}{\delta} \frac{KM_J}{J(J+1)} = \frac{U}{7,3} M_J,$$

где U выражено в кВ. При $M_J = 1$ имеем:

$$a(100) = 13,8; a(60) = 8,2; a(40) = 5,5.$$

Такие значения параметра a соответствуют эффекту Штарка в „сильных“ и „средних“ полях квадрупольного конденсатора.

В случае произвольного значения a длину квадрупольного конденсатора L можно представить формулой

$$L = L_0 \beta(a),$$

где

$$L_0 = R(\pi/a) \sqrt{kT/2\delta}$$

есть длина конденсатора при $a \ll 1$,

$$a \quad \beta(a) = \begin{cases} 1 + \frac{2}{\pi} \left[\sqrt{2(a-1)} \arcsin \sqrt{\frac{2(a-1)}{2a-1}} \right] & \text{при } a > 1; \\ 1 & \text{при } a \leq 1. \end{cases}$$

Формула (3) точна в предельных случаях $a \ll 1$ и $a \gg 1$ и дает приближенные значения в промежуточных случаях. Для всех трех рассматриваемых напряжений U формула (3) дает численные значения $L = 50 \div 60$ см.

Число молекул с данным значением $|M_J|$, которое отсортировывается квадрупольным конденсатором, согласно (1) и (2), равно

$$N_{JK|M_J|} = 2N_{JKM_J} \frac{W_m(M_J)}{kT} = N_0 F(a, M_J),$$

где

$$F(a, M_J) = \frac{W_m(M_J)}{\delta} = \sqrt{1 + a^2 M_J^2} - 1,$$

$$N_0 = 2N_{JKM_J} \frac{\delta}{kT} = 1,3 \cdot 10^{12}$$

(радиус печи R_n положен равным радиусу конденсатора $R = 1$ см). При выбранном типе волны E_{001} направление электрического поля в резонаторе перпендикулярно направлению электрического поля в квадрупольном конденсаторе. Число молекул, имеющих данное значение $|M'_J|$ проекции момента J на направление поля в резонаторе, равно

$$N_{JK|M'_J|} = \sum_{M_J = -J}^{M_J = J} a_{M_J M'_J}^2 N_{K|M_J|}.$$

Матрица $a_{M_J M'_J}$, соответствующая переходу от представления JKM_J к представлению JKM'_J , определяется системой уравнений [1]

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sqrt{(J+M'_J+1)(J-M'_J)} a_{M_J M'_J+1} + \\ & + \frac{1}{2} \sqrt{(J+M'_J)(J-M'_J+1)} a_{M_J M'_J-1} = M_J a_{M_J M'_J} \\ & (M_J M'_J = -J, -J+1, \dots, 0, \dots, J-1, J), \end{aligned}$$

решение которой может быть записано в общем виде с помощью цепных дробей. Для случая $J=6$ численные значения коэффициентов $a^2_{M_J M'_J}$, нормированных на $2^{2J} = 4096 \left(\sum_{M_J M'_J = -J}^J a^2_{M_J M'_J} = 2^{2J} \right)$, представлены в табл. 1. С помощью этих коэффициентов можно записать

$$N_{JK|M'_J} = N_0 \varphi(a, M'_J),$$

где

$$\varphi(a, M'_J) = 2 \sum_{M_J=1}^6 F(a, M_J) a^2_{M_J M'_J}.$$

Т а б л и ц а 1

| $ M_J \backslash M'_J $ | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
|---------------------------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| 0 | 400 | 0 | 420 | 0 | 504 | 0 | 924 |
| 1 | 0 | 400 | 40 | 360 | 192 | 264 | 792 |
| 2 | 420 | 40 | 289 | 324 | 30 | 660 | 495 |
| 3 | 0 | 360 | 324 | 4 | 480 | 660 | 220 |
| 4 | 504 | 192 | 30 | 480 | 676 | 352 | 66 |
| 5 | 0 | 264 | 660 | 660 | 352 | 100 | 12 |
| 6 | 924 | 792 | 495 | 220 | 66 | 12 | 1 |

Минимальная добротность резонатора Q_0 , при которой выполняется условие самовозбуждения молекулярного генератора, определяется соотношением [1]

$$\frac{1}{Q_0} = \frac{4l}{R_{\text{рез}}^2 v^2 \hbar} \sum_{M'_J=1}^6 N_{JK|M'_J} |d_{JKM'_J}|^2,$$

где $d_{JKM'_J}$ — матричный элемент дипольного момента, соответствующий переходу между нижним и верхним инверсионными состояниями молекулы.

$$|d_{JKM'_J}|^2 = d_0^2 \left[\frac{KM'_J}{J(J+1)} \right]^2 = d_0^2 x_{M'_J}, \quad (5)$$

где $x_{M'_J} = [KM'_J/J(J+1)]^2$. С помощью (5) и (4) запишем

$$\frac{1}{Q_0} = \frac{4ld_0^2}{R_{\text{рез}}^2 v^2 \hbar} N_0 \Phi(a), \quad (6)$$

где

$$\Phi(a) = \sum_{M'_J=1}^6 \varphi(a, M'_J) x_{M'_J}.$$

Численные значения $\Phi(a)$ для случая $J=6, K=6$ приведены в табл. 2. Там же приведены соответствующие значения Q_0 .

Т а б л и ц а 2

| $U(\kappa\text{в})$ | $a(U)$ | $\Phi(a)$ | Q_0 | $P_0(\text{см})$ |
|---------------------|--------|-----------|-------|----------------------|
| 100 | 13,7 | 60,1 | 4500 | $9,8 \cdot 10^{-12}$ |
| 60 | 8,2 | 35,3 | 7600 | $5,8 \cdot 10^{-12}$ |
| 40 | 5,5 | 23,3 | 11600 | $3,7 \cdot 10^{-12}$ |

Считая электрическое поле в резонаторе E однородным, мощность излучения молекул в резонатор можно записать в виде

$$P = \frac{V}{8\pi} \frac{\omega}{Q} |E|^2, \quad (7)$$

где ω — частота генерации, V — объем резонатора, Q — эффективная добротность резонатора с учетом потерь, обусловленных отводом мощности из резонатора. Амплитуду электрического поля $|E|$ можно выразить через параметр насыщения

$$F = \frac{\tau^2 d_0^2}{\hbar^2} |E|^2, \quad (8)$$

который можно определить из соотношения [1]

$$\frac{1}{Q} = \frac{4ld_0^2}{R_{\text{рез}}^2 \hbar^2} \sum_{M'_J=1}^6 \frac{N_{JK|M'_J} x_{M'_J}}{1 + x_{M'_J} F}$$

Вводя обозначение

$$\eta_{M'_J} = \frac{N_{JK|M'_J} x_{M'_J}}{\sum_{M'_J=1}^6 N_{JK|M'_J} x_{M'_J}} = \frac{\varphi(a, M'_J) x_{M'_J}}{\Phi(a)}$$

и принимая во внимание (6), можно написать

$$\frac{Q_0}{Q} = \sum_{M'_J=1}^6 \frac{\eta_{M'_J}}{1 + x_{M'_J} F} \equiv f(F).$$

При оценке мощности генератора, как следует из численных расчетов, обратную функцию $F = f^{-1}(Q_0/Q)$ можно представить в виде

$$F \approx 1,35 \left(\frac{Q}{Q_0} - 1 \right). \quad (9)$$

С помощью (7), (8), (9) и (6) получим

$$P = \left(1 - \frac{Q_0}{Q} \right) P_0(a),$$

где

$$P_0(a) = 0,72 \Phi(a) \hbar \omega N_0.$$

Значения $P_0(a)$ представлены в табл. 2.

ЛИТЕРАТУРА

1. Н. Г. Басов, Молекулярный генератор, Докторская диссертация, ФИАН, 1956.
2. J. P. Gordon, H. J. Zeiger, C. H. Townes, Phys. Rev., 1955, 99, 1264.
3. J. P. Gordon, Phys. Rev., 1955, 99, 1253.
4. G. R. Gunter-Mohr, C. H. Townes, J. H. Van Vleck, Phys. Rev., 1954, 94, 1191.
5. H. G. Bennowitz, W. Paul, Zeit. f. Phys., 1954, 139, 489.
6. R. G. Nuckolls, L. J. Rueger, H. Lyons, Phys. Rev., 1953, 89, 1101.
7. Н. Г. Басов, А. М. Прохоров, ЖЭТФ, 1954, 27, 431.
8. C. H. Townes, A. L. Schawlow, Microwave Spectroscopy, New York, 1955.
9. Г. Герцберг, Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул, ИЛ, 1949.
10. Landolt-Börnstein, Zahlenwerte und Funktionen aus Physik, Chemie, Astronomie, Geophysik und Technik, 1, Tl. 3, Berlin, 1951.

Физический институт
АН СССР

Поступила в редакцию
10 ноября 1957 г.