

О ВОЗМОЖНОСТИ СОЗДАНИЯ ОТПАЯННОГО МОЛЕКУЛЯРНОГО ГЕНЕРАТОРА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОЛЕКУЛ ND_3 , NH_2D и NHD_2

Н. Г. Басов и А. Н. Ораевский

Рассмотрена возможность создания отпаянного молекулярного генератора, использующего инверсионные уровни дейтерированного аммиака: ND_3 , NHD_2 , NH_2D .

Для получения активных молекул в таком генераторе предполагается применять метод вспомогательного излучения, использующий систему из трех энергетических уровней. Проведен выбор систем энергетических уровней для молекул дейтерированного аммиака ND_3 , NH_2D , NHD_2 . Дана теория и расчет генератора для выбранных систем энергетических уровней.

На принципиальную возможность осуществления отпаянного молекулярного генератора и усилителя, использующего вместо пучка молекул разреженный газ, с применением сортировки молекул с помощью вспомогательного излучения [1] было указано в работе [2]. Некоторые вопросы теории таких генераторов рассмотрены в статье [3].

В ряде работ был проведен расчет отпаянных молекулярных генераторов и усилителей с использованием молекул ND_3 [3, 4], NH_2D и NHD_2 [5].

В статьях [6, 7] рассмотрен вопрос о применении метода получения активных молекул с помощью вспомогательного излучения для генераторов и усилителей на кристаллах с использованием электронного парамагнитного резонанса. Подобный тип генератора был осуществлен на кристалле этилсульфата гадолиния при температуре жидкого гелия [8]. В работе [9] дан анализ смещения частот генераторов и усилителей, использующих вспомогательное излучение. В настоящей статье рассматриваются некоторые вопросы теории отпаянного молекулярного генератора и усилителя и приводятся результаты расчета отпаянных генераторов на молекулах ND_3 , NH_2D и NHD_2 .

При использовании вспомогательного излучения для получения активных молекул необходимо, чтобы молекулы обладали системой энергетических уровней, изображенных на рис. 1а и 1б.

Энергии, характеризующие уровни, должны быть такими, чтобы*

$$E_{1a} - E_{2a} \ll E_{1a} - E_{3a} \text{ и } E_{1b} - E_{3b} \gg E_{2b} - E_{3b}. \quad (1)$$

Тогда в термодинамическом равновесии число молекул N_3 на уровне 3 больше числа молекул N_2 и N_1 на уровне 2 и 1, так как в этом случае число молекул на уровне определяется фактором Больцмана. Вспомогательное излучение, частота которого

$$\nu_{всп}^{a, б} = \frac{E_{1a, б} - E_{3a, б}}{h} \quad (2)$$

* В принципе, для получения отличного от нуля числа активных молекул (при условии, что $h\nu_{всп} \ll kT$) необходимо, чтобы $2(E_{1a} - E_{2a}) \ll E_{1a} - E_{3a}$ и $E_{1b} - E_{3b} \gg 2(E_{2b} - E_{3b})$, что видно из равенства (5).

(h — постоянная Планка), „забрасывает“ молекулы с уровня 3 на уровень 1, создавая избыток молекул на уровне 1 по сравнению с уровнем 2 (см. рис. 1а) или на уровне 2 по сравнению с уровнем 3 (см. рис. 1б). Переходы $1a \rightarrow 2a$ и $2b \rightarrow 3b$

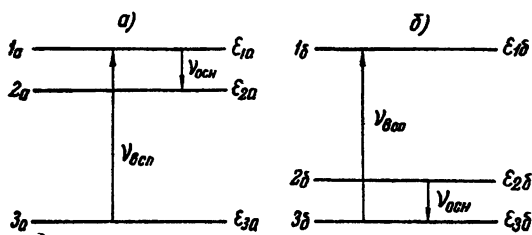


Рис. 1.

используются для возбуждения резонатора, частота которого ν_0 должна настраиваться на частоту

$$\nu_{\text{осн}} = \frac{E_{1a} - E_{2a}}{h} \quad (3)$$

(рис. 1а) или на частоту

$$\nu_{\text{осн}} = \frac{E_{2b} - E_{3b}}{h} \quad (4)$$

(рис. 1б).

Наибольшее число активных молекул получается при достижении эффекта насыщения на частоте $\nu_{\text{всп}}^{a,b}$. В этом случае число активных молекул, получаемых в секунду, равно

$$N_{\text{акт}} = \frac{1}{\tau} \left\{ \frac{1}{2} (N_3 - N_1) + N_1 - N_3 \right\} \quad (\text{в случае а}); \quad (5)$$

$$N_{\text{акт}} = \frac{1}{\tau} \left\{ \frac{1}{2} (N_3 - N_1) + N_2 - N_3 \right\} \quad (\text{в случае б}).$$

В этих формулах τ — среднее время релаксации газа, определяемое временем свободного пробега молекул. Если газ облучается монохроматическим излучением частоты $\nu_{\text{всп}}$, то для достижения эффекта насыщения на вспомогательной частоте нужно, практически, чтобы удовлетворялось условие [10]

$$\frac{|d_{31}|^2}{h^2} E^2 = (\Delta\nu_{\text{всп}})^2, \quad (6)$$

где $|d_{31}|^2$ — квадрат матричного элемента дипольного момента для перехода $3 \rightarrow 1$; $\Delta\nu_{\text{всп}}$ — ширина линии излучения на частоте $\nu_{\text{всп}}$; E — амплитуда вспомогательного излучения.

Минимальная ширина спектральной линии, на которой работает отпаянный молекулярный генератор, равна доплеровской ширине линии основного перехода $\Delta\nu_{\text{осн}}^{\text{доп}}$. Поэтому давление газа в резонаторе следует выбрать таким, чтобы ширина линии основной частоты, обусловленная соударениями, была равна $\Delta\nu_{\text{осн}}^{\text{доп}}$. При более высоком давлении ширина линии увеличится, что приведет к понижению стабильности генератора; при меньшем давлении мы проиграем в числе активных молекул, не имея выигрыша в стабильности. Поэтому оптимальное давление в системе будет определяться условием

$$p \approx 2\pi \Delta\nu_{\text{осн}}^{\text{доп}} \frac{1}{\tau_0} \frac{T}{300}, \quad (7)$$

где p — давление в мм рт. ст.; τ_0 — время свободного пробега для молекул рассматриваемого газа при давлении в 1 мм рт. ст. и температуре 300°K; T — температура газа по шкале Кельвина; $\Delta\nu_{\text{осн}}^{\text{доп}}$ — доплеровская ширина линии основной частоты.

Так как $\nu_{\text{всп}}$ значительно больше $\nu_{\text{осн}}$, то и доплеровская ширина вспомогательного перехода $\Delta\nu_{\text{всп}}^{\text{доп}}$ будет значительно больше доплеровской ширины основного перехода $\Delta\nu_{\text{осн}}^{\text{доп}}$. Если амплитуду

вспомогательного излучения определить из условия (6), то вспомогательное излучение сильно уширит линию основного перехода из-за эффекта насыщения: величина $|d_{31}|^2/h E^2$, пропорциональная обратной величине времени пребывания молекул на энергетическом уровне, будет порядка $(\Delta\nu_{\text{всп}}^{\text{доп}})^2$, что значительно больше $(\Delta\nu_{\text{осн}}^{\text{доп}})^2$. Однако, если воспользоваться не монохроматическим излучением, а набором частот в интервале $\Delta\nu_{\text{всп}}^{\text{доп}}$ с расстоянием между частотами порядка $\Delta\nu_{\text{осн}}^{\text{доп}}$, и выполнить на каждой гармонике E_k менее сильное условие насыщения

$$\frac{|d_{31}|^2}{h^2} E_k^2 = (\Delta\nu_{\text{осн}}^{\text{доп}})^2, \quad (8)$$

то мы получим то же число молекул, что и в случае [6]. В то же время ширина спектральной линии основного перехода будет близка к минимальной ширине $\Delta\nu_{\text{осн}}^{\text{доп}}$. В самом деле, доплеровское уширение вспомогательного перехода обусловлено изменением собственных частот молекул из-за распределения молекул по скоростям. Это уширение вспомогательного перехода значительно больше уширения линии из-за соударений (которое равно $\Delta\nu_{\text{осн}}^{\text{доп}}$ согласно условию (7)).

Если на молекулу с собственной частотой, измененной из-за эффекта Доплера, действовать полем с амплитудой, определяемой из соотношения (8), то время нахождения молекулы на каждом уровне будет обратно величине $\Delta\nu_{\text{осн}}^{\text{доп}}$. Это время и определяет ширину спектральной линии основного перехода.

Согласно (8), запасенная в резонаторе энергия вспомогательного излучения определяется формулой

$$W_{\text{зап}} = \sum_k \frac{E_k^2}{8\pi} V = \frac{V}{8\pi} \frac{h^2}{|d_{31}|^2} \Delta\nu_{\text{осн}}^{\text{доп}} \Delta\nu_{\text{всп}}^{\text{доп}}. \quad (9)$$

Здесь $W_{\text{зап}}$ — энергия вспомогательного излучения, запасенная в резонаторе с объемом V . Если $Q_{\text{всп}}$ — добротность резонатора на вспомогательной частоте, то необходимая для насыщения мощность вспомогательного излучения равна

$$P_{\text{всп}} = \frac{2\pi\nu_{\text{всп}}}{Q_{\text{всп}}} W_{\text{зап}}. \quad (10)$$

Следует заметить, что при использовании набора частот мощность вспомогательного излучения, необходимая для достижения эффекта насыщения, меньше мощности монохроматического излучения в $\nu_{\text{всп}}/\nu_{\text{осн}}$ раз.

Для определения размеров резонатора необходимо выбрать тип колебаний, который будет возбуждаться в резонаторе. Волна типа E_{001} в цилиндрическом резонаторе обладает тем свойством, что соответствующий ей объем резонатора минимален. Это обеспечивает минимальную мощность вспомогательного излучения, если считать добротности различных низких типов колебаний равными. Поэтому числовой расчет, результаты которого даны ниже, проводился для этого типа волны. Заметим, что условие самовозбуждения для отпаянного молекулярного генератора не зависит от типа колебаний в резонаторе и от давления и может быть записано в виде [3, 4]

$$\beta = 2 \cdot 10^{36} \frac{h\nu_{\text{всп}}}{kT} q \frac{Q}{\Sigma_0} \sum_M |d_M^M|^2 \alpha_M > 1, \quad (11)$$

где q — статистический вес состояния молекулы, используемого для

возбуждения генератора; Σ_0 —статистическая сумма; Q —добротность резонатора на основной частоте; d_M^M —матричный элемент дипольного момента для основного перехода; α_M —вероятность того, что проекция момента молекулы на направление генерируемого электрического поля равна M . Выражение (12) записано в предположении, что $kT \gg h\nu_{\text{всп}}$. Так как у молекулы ND_3 расстояние между соседними вращательными уровнями $E_{JK} - E_{J-1, K}$ гораздо больше инверсионного расщепления $E_{JK}^+ - E_{JK}^-$, то вращательно-инверсионные переходы $(J-1)_K^- \rightarrow J_K^+$ между соседними уровнями могут быть использованы в качестве вспомогательных; инверсионные переходы будут играть роль основных для возбуждения генератора. Система энергетических уровней вращательно-инверсионного спектра ND_3 схематически изображена на рис. 2. Как видно из рисунка, здесь реализуются сразу оба случая а и б, изображенных на рис. 1.

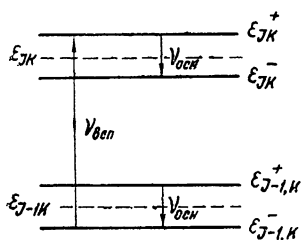


Рис. 2.

Вращательные переходы для ND_3 имеют частоту от $3 \cdot 10^{11}$ гц [11] и выше; частота растет с ростом квантового числа J . Получение требуемых мощностей на этих частотах сопряжено с большими трудностями. Поэтому имеет смысл говорить об использовании переходов лишь с самыми малыми J . Однако в силу правил отбора переход $0_0^- \rightarrow 1_0^+$ использовать нельзя. Дело в том, что при переходе $0_0^- \rightarrow 1_0^+$ активные молекулы получают лишь с $K=0$; интенсивность же инверсионных переходов пропорциональна K^2 . Следовательно, инверсионные переходы с $K=0$ будут запрещены. Поэтому самым низкочастотным переходом, который мы можем применить для построения генератора, является переход $1_1^- \rightarrow 2_1^+$. Этот переход и был положен в основу расчета, причем в качестве основного использовался переход $1_1^+ \rightarrow 1_1^-$.

В результате расчета для основных величин, характеризующих генератор, получаем:

- | | |
|---|---|
| 1. Основная частота | 1598,10 мгц [12] |
| 2. Вспомогательная частота | $6,2 \cdot 10^{11}$ гц |
| 3. Допплеровская ширина линии на основной частоте | $2,2 \cdot 10^8$ гц |
| 4. Допплеровская ширина линии на вспомогательной частоте | $8,5 \cdot 10^5$ гц |
| 5. Добротность резонатора, необходимая для возбуждения генератора | $3 \cdot 10^8$ |
| 6. Мощность вспомогательного излучения | $4 \cdot 10^{-5}$ вт |
| 7. Число активных молекул | $6 \cdot 10^{15}$ молекул сек^{-1} |
| 8. Мощность, развиваемая генератором | $\sim 10^{-10}$ вт |

При расчете $Q_{\text{всп}}$ полагалось $\sim 10^5$. Если считать, что резонатор можно настроить на частоту $\nu_{\text{осн}}$ с точностью 0,5%, то такой генератор может служить эталоном частоты с точностью $\sim 10^{-8}$ *

Основной трудностью при создании отпаянного молекулярного генератора, использующего ND_3 , является получение достаточно мощного излучения на длине волны 0,5 мм . Молекулы частично дейтерированного аммиака являются асимметричными волчками, и поэтому обладают более „богатым“ спектром, чем ND_3 . Может оказаться,

* Следует учитывать также некоторый сдвиг частоты генерации при изменении частоты вспомогательного излучения [9]. Однако, если пользоваться не монохроматическим излучением, а целым набором частот в интервале $\Delta\nu_{\text{всп}}^{\text{доп}}$, как это указывалось выше, сдвиг частоты генерации в первом приближении будет отсутствовать.

что у этих молекул найдутся такие системы уровней, в которых вспомогательный переход имеет большую длину волны, чем у ND_3 .

С этой целью был произведен расчет вращательного спектра молекул NH_2D и NHD_2 [5]. Однако точность расчета мала, так как вращательные постоянные для этих молекул не известны с достаточной степенью точности.

В таблице 1 указаны значения частот основного и вспомогательного излучения для молекул NH_2D и NHD_2 , а также интенсивности этих линий, которые были найдены путем расчета на основании данных, полученных в работе [13]. В таблице 2 приведены параметры отпаянных молекулярных генераторов для спектральных линий, указанных в таблице 1.

Таблица 1

Молекула	Вспомогательный переход	Частота и длина волны вспомогательного перехода (цц, мм)	Коэффициент поглощения ($\lambda \cdot \text{см}^{-1}$)	Низкочастотный переход	Частота и длина волны низкочастотного перехода [?] (мгц, см)
NH_2D	$4_{31} \rightarrow 5_{05}$	$\nu = (1,573 \pm 0,2) \cdot 10^{11}$ $\lambda = 1,9$	$0,2 \cdot 10^{-6}$	$5_{05} \rightarrow 5_{15}$	$\nu = 7562,06$ $\lambda = 3,98$
NH_2D	$6_{33} \rightarrow 7_{07}$	$\nu = (1,173 \pm 0,3) \cdot 10^{11}$ $\lambda = 2,6$	$0,2 \cdot 10^{-6}$	$7_{07} \rightarrow 7_{17}$	$\nu = 12154,57$ $\lambda = 2,48$
NHD_2	$8_{26} \rightarrow 9_{15}$	$\nu = (1,394 \pm 0,4) \cdot 10^{11}$ $\lambda = 2,1$	$66 \cdot 10^{-6}$	$8_{26} - 8_{36}$	$\nu = 29319,47$ $\lambda = 1,02$

Таблица 2

Молекула	$\nu_{\text{всп}}$ (цц)	$\nu_{\text{осн}}$ (цц)	$\Delta\nu_{\text{осн}}$ (цц)	$P_{\text{всп}}$ (вт)	Q_0	Давление (мм рт. ст.)	Число активных молекул в сек	$P_{\text{осн}}$ (вт)
NH_2D $4_{31} \rightarrow 5_{05}$	$1,573 \cdot 10^{11}$	$0,756 \cdot 10^{10}$	$1,03 \cdot 10^4$	$2 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^3$	$0,4 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{14}$	$5 \cdot 10^{-10}$
NH_2D $6_{33} \rightarrow 7_{07}$	$1,173 \cdot 10^{11}$	$1,215 \cdot 10^{10}$	$1,66 \cdot 10^4$	$2 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^3$	$0,6 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{14}$	$8 \cdot 10^{-10}$
NHD_2 $8_{26} \rightarrow 9_{15}$	$1,394 \cdot 10^{11}$	$2,932 \cdot 10^{10}$	$4,01 \cdot 10^4$	$1 \cdot 10^{-7}$	$1 \cdot 10^4$	$1,3 \cdot 10^{-3}$	$1,5 \cdot 10^{13}$	$2 \cdot 10^{-10}$

ЛИТЕРАТУРА

1. Н. Г. Басов, А. М. Прохоров, ЖЭТФ, 28, 249 (1955).
2. Н. Г. Басов, А. М. Прохоров, УФН, 57, 485 (1955).
3. Н. Г. Басов, Диссертация, ФИАН, 1956.
4. Н. Г. Басов, А. Н. Ораевский, Об отпаянном молекулярном генераторе, использующем инверсионные переходы молекулы ND_3 , отчет ФИАН, 1956.
5. Н. Г. Басов, А. Н. Ораевский, О возможности создания отпаянного молекулярного генератора на молекулах NH_2D и NHD_2 , отчет ФИАН, 1957.
6. N. Bloembergen, Phys. Rev., 104, 324 (1957).
7. M. W. P. Strandberg, Proc. IRE, 45, 93 (1957).
8. H. E. D. Scovil, C. Feher, H. Seidel, Phys. Rev., 105, 372 (1957).
9. В. И. Конторович, А. М. Прохоров, ЖЭТФ, 33, 1428 (1957).
10. В. Горди, В. Смит, Р. Трамбароло, Радиоспектроскопия, ИЛ, М., 1956.
11. G. Erlandsson a. W. Gordy, Bull. Amer. Phys. Soc., 2, 212.

12. R. G. Nuckols, L. J. Rueger, H. Lyons, *Phys. Rev.*, **89**, 1101 (1953).

13. M. T. Weiss, M. W. P. Strandberg, *Phys. Rev.*, **83**, 567 (1951).

Физический институт имени П. Н. Лебедева
АН СССР

Поступила в редакцию
10 ноября 1957 г.