

ВЛИЯНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ ЗНАЧЕНИЙ КОЭФФИЦИЕНТОВ ЭЙНШТЕЙНА НА ТЕМПЕРАТУРНОЕ ПОВЕДЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ УДАРНОГО САМОУШИРЕНИЯ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ CO₂

Аршинов К.И., Бобровский В.В., Крапивная О.Н., Шут В.Н.

Институт технической акустики НАН Беларуси, Витебск, Беларусь

Изучено влияние отклонения коэффициентов спонтанного излучения при решении обратной задачи на вид температурной зависимости коэффициента ударного самоуширения $\gamma(T)$ спектральных линий молекулы CO₂. Параметр A существенно влияет на величину коэффициента поглощения, но, в силу отсутствия причинно-следственной связи между γ и A , он практически не оказывает влияние на вид функции $\gamma(T)$.

Вид функций $\gamma(T)$ колебательно-вращательных линий молекулы CO₂ необходимо знать при расчетах переноса излучения в атмосфере и проектировании CO₂-лазеров, а также при многочастотной диагностике нагретых газообразных продуктов сгорания. Из анализа работ экспериментального определения γ и A для линии $P(20)$ перехода 10^00-00^01 CO₂ при $T=296$ К следует, что значения γ находятся в диапазоне $6.5 \div 10.3$ МГц/Тор, $A = 0.15 \div 0.32$ с⁻¹ [1]. В работе [2] отмечается, что показатель степени n функции $\gamma(T)$ зависит от выбранного температурного диапазона и предлагается рассматривать несколько зависимостей типа $\gamma(T) = \gamma(T_0)(T_0/T)^n$ не объясняя причин получения разных n и T_0 . Относительные коэффициенты ударного уширения линий CO₂ буферными газами $\beta_{CO_2-M_j}(T)$ также отличаются. В [2-4], например, для линий $R22$ и $R34$ перехода 00^00-22^01 с ростом температуры функции $\beta_{CO_2-M_j}(T)$ имеют слабо спадающий вид как для N₂, так и O₂. В [5] для этих линий получены разнонаправленные температурные зависимости $\beta_{CO_2-N_2}(T)$ и $\beta_{CO_2-O_2}(T)$. В [6, 7] использовался метод наименьших квадратов (МНК), позволяющий совместно определить параметры A и γ . Принцип максимального правдоподобия при нормальном законе распределения ошибок приводит к вычислительной схеме МНК, которая позволяет получать состоятельные, несмещенные и эффективные оценки [8]. Цель данной работы состоит в выяснении влияния неопределенности значений вероятностей спонтанного излучения на температурное поведение коэффициентов ударного самоуширения спектральных линий молекул CO₂. Рассмотрена линия $R22$ перехода 10^00-00^01 молекулы CO₂. Методика расчетов подробно изложена в работе [7], где также представлены КП, измеренные в диапазоне давлений 5-30 Тор и температур 300-700 К. На основании этих данных были совместно определены A и γ (см. таблицу).

Таблица. A и γ

T, K	300	310	320	330	350	400	450	500	600	700
$\gamma, \text{МГц/Тор}$	10,76	10,44	10,45	10,08	9,069	7,501	6,556	5,668	4,803	4,7
$A, \text{с}^{-1}$	0,2783	0,3217	0,3540	0,3729	0,3806	0,3558	0,3230	0,2775	0,2394	0,2350

Установлено, что функция $\gamma(T)$ имеет следующий вид: $\gamma(T) = \gamma_c(T_c/T)^n$, где $T_c=463$ К, $\gamma_c=6,315$ МГц/Тор, $n=n_1=1,361$ при $T < T_c$, $n=n_2=0,887$ при $T > T_c$ [7]. Для выяснения степени влияния A на вид $\gamma(T)$ были рассчитаны зависимости КП от давления в диапазоне 5-30 Тор при некоторой фиксированной температуре с наложением гауссова шума ($0,05 \cdot \alpha_{\min}$) для двух вариантов: 1) $A=0,2022$ с⁻¹ [9]; 2) A из таблицы. На рис. 1 представлены эти зависимости при температуре $T=300$ К, которые были использованы в качестве исходных данных для совместного определения γ и A .

Совместное определение параметров $\{A, \gamma\}$, по сути, представляет собой процесс получения двумерных случайных величин (СВ) $\alpha(A, \gamma)$. Связь, которая существует между случайными величинами разной природы, например, между СВ γ и СВ A , не обязательно является следствием прямой зависимости одной величины от другой, так называемой функциональной связью. В некоторых случаях обе СВ зависят от целой совокупности разных факторов, общих для обоих параметров, в результате чего и формируется связанная друг с другом закономерности. Когда связь между СВ обнаружена с помощью статистики, нельзя утверждать, что обнаружена причина происходящего изменения параметров, скорее проявились два взаимосвязанных следствия. В нашем случае случайной величиной, описывающей характеристику рассматриваемого физического объекта, является КП α в центре линии. Ранее было установлено, что функция плотности вероятностей для КП имеет нормальное распределение. Известно, что если двумерная СВ $\alpha(A, \gamma)$ имеет нормальное распределение ошибок, то аналогичные распределения имеют СВ (A) и СВ (γ) . Для выборки из 30 квазиразрешений обратной задачи для $T=300$ К был определен коэффициент корреляции $r=0,981$. Тем не менее, наличие корреляции не означает наличия функциональной (причинно-следственной) связи между параметрами γ и A [10]. Корреляция может быть случайной и объясняться иными факторами, оставшимися за рамками анализа, т.е. причинно-следственные связи порождают корреляцию, но корреляция не означает наличия причинно-следственных связей. Для прояснения возможности возникновения взаимной связи между параметрами γ и A рассмотрим получение выражения для КП. Ненасыщенный коэффициент поглощения для двухуровневой модели CO_2 -лазера может быть представлен в виде [11, 12]

$$\alpha_{if} = \frac{h\nu}{c} (N_i B_{if} - N_f B_{fi}) F(\nu_0), \quad (1)$$

где населенности нижнего i и верхнего f уровней [13]

$$N_i = N_0 Q_V^{-1} Q_{Ri}^{-1} g_i \exp(-E_i/kT), \quad N_f = N_0 Q_V^{-1} Q_{Rf}^{-1} g_f \exp(-E_f/kT). \quad (2)$$

В условиях термодинамического равновесия согласно принципа детального равновесия можно записать равенство $N_f [A_{fi} + B_{fi} \rho(\nu, T)] = N_i B_{if} \rho(\nu, T)$ из которого с учетом (2) получаем выражение для $\rho(\nu, T)$, где $\rho(\nu, T)$ - спектральная объемная плотность энергии электромагнитного поля,

$$\rho(\nu, T) = \frac{A_{fi}}{B_{fi}} \left[\frac{Q_{Ri}^{-1} g_i B_{if} \exp(-E_i/kT)}{Q_{Rf}^{-1} g_f B_{fi} \exp(-E_f/kT)} - 1 \right]^{-1} \quad (3)$$

Сравнивая (3) с формулой Планка $\rho(\nu, T) = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \left[\exp\left(\frac{E_f - E_i}{kT}\right) - 1 \right]^{-1}$ имеем

$$\frac{A_{fi}}{B_{fi}} = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3}, \quad \frac{Q_{Ri}^{-1} g_i B_{if}}{Q_{Rf}^{-1} g_f B_{fi}} = 1. \quad (4)$$

Подставляя (2) в (1) с учетом (4), для ненасыщенного КП получаем

$$\alpha_{if} = \frac{c^2}{8\pi \nu^2} N_0 A_{fi} Q_V^{-1} Q_{Rf}^{-1} g_f \left[e^{-\frac{E_i}{kT}} - e^{-\frac{E_f}{kT}} \right] F(\nu_0), \quad \text{где } g_f = 2J_f + 1 \text{ - весовой коэффициент вырождения}$$

верхнего уровня 00^0_1 , J_f - квантовое число верхнего вращательного уровня. Выражение для спектрального КП содержит коэффициент ударного самоуширения γ в форм-факторе $F(\nu_0)$, в то время как параметр A привлекается для рассмотрения вынужденного поглощения и испускания излучения. Следовательно, получение выражения для ненасыщенного КП не выявило функциональной связи между γ и A . Далее были рассчитаны зависимости КП от давления $\alpha(p)$ для всего диапазона температур (300–700 К) для двух случаев: 1) A из таблицы; 2) $A=0,2022 \text{ с}^{-1}$. Используя рассчитанные с наложенным шумом КП (см.рис.1), осуществлен совместный расчет искомых параметров $\{\gamma_c, A, T_c, n_1, n_2\}$. Результаты решения обратной задачи для $\gamma(T)$ представлены на рис. 2.

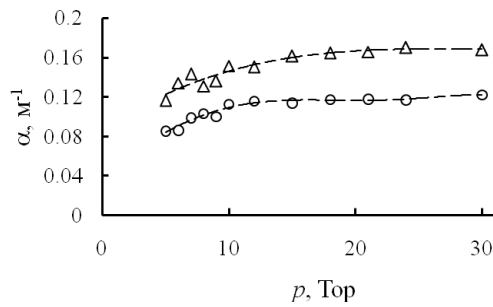


Рис. 1. Зависимость рассчитанных коэффициентов поглощения α (наложен гауссов шум $0.05 \cdot \alpha_{\min}$) от давления CO_2 для линии R22: ○ – $A=0,2022 \text{ c}^{-1}$ [9], Δ – $A=0,2783 \text{ c}^{-1}$ (таблица), $T=300 \text{ K}$

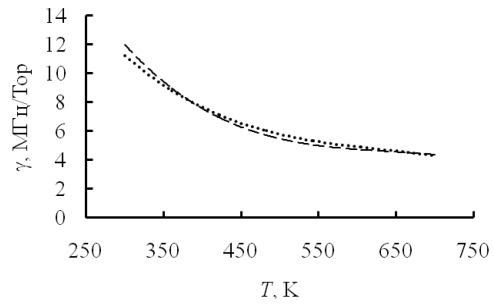


Рис. 2. Зависимости $\gamma(T)$ линии R22 перехода 10^00-00^01 CO_2 в диапазоне 300-700 K: СКО КП $\sigma=0,05\alpha_{\min}$; ----- A из таблицы, -.-.- A=0,2022 c^{-1}

На рис. 2 видно, что для двух вариантов расчета имеет место практически полное совпадение функций $\gamma(T)$. Аппроксимации полученных зависимостей имеют вид:

- 1) $\gamma_c=5,834 \pm 1 \text{ МГц/Тор}$, $T_c=492 \pm 49 \text{ K}$, $n=n_1=1.33 \pm 0.006$ при $T < T_c$, $n=n_2=0,873 \pm 0.038$ при $T > T_c$, (A из таблицы);
- 2) $\gamma_c=5,352 \pm 1 \text{ МГц/Тор}$, $T_c=502 \pm 49 \text{ K}$, $n=n_1=1.572 \pm 0,006$ при $T < T_c$, $n=n_2=0,633 \pm 0.038$ при $T > T_c$, ($A=0,2022 \text{ c}^{-1}$).

Данные из рис. 2 позволяют считать, что в диапазоне 300-700 K параметры γ и A находятся в слабой взаимной зависимости. Параметр A линейно входит в выражение КП и существенно влияет на величину КП, но, в силу отсутствия функциональной связи между γ и A , он не оказывает влияние на вид функции $\gamma(T)$.

1. А.С. Бирюков, А.Ю. Волков, Е.М. Кудрявцев, Р.И. Сериков, *Квант. электр.*, **3**, №8, 1748-1754, (1976).
2. J. Lamouroux, R.R. Gamache, A.L. Laraia, J.-M. Hartmann, C. Boulet, *J.of Quant. Spectr. & Radiat.Trans.*, **113**, 1536–1546, (2012).
3. R.R. Gamache, J. Lamouroux, A.L. Laraia, J.-M. Hartmann, C. Boulet, *J.of Quant. Spectr. & Radiat.Trans.*, **113**, 976–990, (2012).
4. R.R. Gamache, J. Lamouroux, A.L. Laraia, J.-M. Hartmann, C. Boulet, *J.of Quant. Spectr. & Radiat.Trans.*, **113**, 991–1030, (2012).
5. L. Rosenmann, J.-M. Hartmann, M.Y. Perrin, J. Taine, *Appl. Opt.*, **27**, 3902-3907, (1988).
6. К.И. Аршинов, Н.С. Лешенюк, *Квант. электр.*, **22**, №3, 239-241, (1995).
7. К.И. Аршинов, О.Н. Крапивная, В.В. Невдах, В.Н. Шут, *Опт. атм. и ок.*, **33**, №1, 5-13, (2020).
8. А.И. Герасимович, *Математ.статистика*, Мн.: Вышэйшая школа, 1983. 279 с.
9. L.S. Rothman et al, *J.of Quant. Spectr. & Radiat.Trans.*, **130**, 4–50, (2013).
10. *Справочник по вероятностным расчетам*, М.: Воениздат, (1970), 536 с.
11. М.А. Ельяшевич, *Атомная и молек. спектроскопия*, М.: ФМЛ, (1962), 892 с.
12. В. Витteman, *CO₂-лазер*, М.: Мир, (1990), 360 с.
13. О.И. Ачасов, Н.Н. Кудрявцев, С.С. Новиков, Р.И. Солоухин, Н.А. Фомин, *Диагн. неравновес. сост. в молек. лазерах*, Мн: Наука и техника, (1985), 208 с.