

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ

Факультет физики

Домашняя работа 2

Лазерная спектроскопия

Работу выполнил студент 3 курса
Захаров Сергей Дмитриевич



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

Москва
2021

Задача 1

- Записать энергии колебательных уровней двухатомной молекулы с учетом ангармонизма;
- Найти энергию возбуждения из основного колебательного состояния в первое на примере молекулы НС, выразить в см^{-1} , если круговая частота $2\pi\nu = 5.6 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$, а константа ангармонизма $x_e = 0.02$.

Для колебательных термов мы можем записать:

$$E_\nu = h\nu_0 \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \left[1 - x_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \right] \quad (1)$$

Для энергии возбуждения мы должны записать разность:

$$\Delta E_{0 \rightarrow 1} = E_1 - E_0 = h\nu \cdot (1 - x_e) \quad (2)$$

Для перевода в см^{-1} мы запишем:

$$k \equiv \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi\nu(1 - x_e)}{c} \approx 18293 \text{ см}^{-1} \quad (3)$$

Задача 2

- Записать выражение для вращательных уровней энергии двухатомной молекулы;
- Найти характерный масштаб расстояний между соседними уровнями на примере молекулы N_2 , выразить в см^{-1} , если вращательная постоянная $B = 2.0 \text{ см}^{-1}$

По всей видимости имеются в виду синглетные термы, для которых мы можем записать:

$$E_r = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) = BJ(J+1) \quad (4)$$

Здесь I — момент инерции, J — вращательное квантовое число, \hbar — постоянная Дирака.

Так как B уже в см^{-1} , переводить ничего никуда не надо, и мы уже будем сразу получать ответ в см^{-1} .

Тогда для перехода:

$$\Delta E_{J \rightarrow J+1} = B(J+1)(J+2) - BJ(J+1) = B(J+1)[(J+2) - J] = 2B(J+1) \quad (5)$$

В таком случае расстояние между уровнями равно $2B = 4 \text{ см}^{-1}$

Задача 3

Для двухатомной молекулы с массами ядер m_1 и m_2 найти температуру, при которой средняя кинетическая энергия поступательного движения равна энергии возбуждения вращательного уровня с $J = 5$. Рассчитать ее для молекулы СО, у которой межъядерное расстояние $d = 0.113 \text{ нм}$.

Очевидно, что центр инерции будет находиться на расстояниях l_1 от ядра массы m_1 и l_2 от ядра массы m_2 , где:

$$\frac{l_1}{l_2} = \frac{m_2}{m_1}, \quad l_1 + l_2 = d \quad \Rightarrow \quad l_1 = \frac{m_2}{m_1 + m_2}d, \quad l_2 = \frac{m_1}{m_1 + m_2}d \quad (6)$$

Тогда для момента инерции относительно этой оси можем записать:

$$I = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} d^2 \quad (7)$$

Из 4 получаем, что:

$$E_r = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) = E_T = \frac{3}{2} kT \quad \Rightarrow \quad T = \frac{\hbar^2 J(J+1)}{3k} \cdot \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2 d^2} \approx 55 \text{ K} \quad (8)$$

Задача 4

Из 5 мы можем записать систему (с учетом B в см^{-1}):

$$\begin{cases} \frac{1}{\lambda_1} = 2B(J_1 + 1) \\ \frac{1}{\lambda_2} = 2B(J_2 + 1) \end{cases} \Rightarrow \frac{\lambda_2}{\lambda_1} = \frac{J_1 + 1}{J_2 + 1} = \frac{4}{3} \Rightarrow J_1 = 3, \quad J_2 = 2 \quad (9)$$

Тогда для B мы можем записать:

$$\frac{1}{2\lambda_1(J_1 + 1)} = \frac{1}{8\lambda_1} \approx 10.7 \text{ см}^{-1} \quad (10)$$

А λ_1 и λ_2 соответствуют переходам $3 \rightarrow 4$ и $2 \rightarrow 3$ соответственно.

Задача 5

Через кювету с газом двухатомных молекул пропускают монохроматический лазерный пучок, длина волны которого настроена на колебательно-вращательный переход с сечением поглощения $\sigma = 10^{-18} \text{ см}^2$. Для молекул с колебательной частотой $\nu = 1000 \text{ см}^{-1}$ и вращательной постоянной $B = 1.5 \text{ см}^{-1}$ для нижнего уровня с $v = 0$, $J = 15$ оценить:

- Долю молекул на этом уровне при температуре 300 К;
- Коэффициент поглощения газа при давлении 20 мбар;
- Мощность лазерного излучения, прошедшего кювету длиной 15 см, при падающей мощности 50 мВт.

Доля молекул

Для энергии колебательного движения запишем:

$$E_0 = \nu_0 \left(0 + \frac{1}{2} \right) = \frac{\nu_0}{2} \quad (11)$$

Для энергии вращательного движения запишем:

$$E_J = BJ(J+1) \quad (12)$$

Для числа молекул:

$$N_J = g_J N_0 \exp\left(-\frac{E_J - E_0}{kT}\right), \quad g_J = 2J + 1 \quad (13)$$

Энергия которую мы получим будет в см^{-1} , поэтому надо kT перевести в те же единицы, для этого:

$$kT = \frac{hc}{\lambda} \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = \frac{kT}{hc} \quad (14)$$

Для числа частиц на 15-ом уровне запишем:

$$N_{15} = N_0(2 \cdot 15 + 1) \exp\left(-hc \frac{B \cdot 15 \cdot (15 + 1) - \nu_0/2}{kT}\right) \approx 61N_0 \quad (15)$$

Для суммарного числа:

$$N = \exp\left(\frac{hc\nu_0}{2kT}\right) N_0 \sum_{J=0}^{\infty} (2J + 1) \exp\left(-\frac{BhcJ(J + 1)}{kT}\right) \approx 1539N_0 \quad (16)$$

Тогда доля равна:

$$\Omega = \frac{61}{1539} \cdot 100\% = 4\% \quad (17)$$

Коэффициент поглощения

$$p = nkT \Rightarrow n = \frac{p}{kT} \Rightarrow n_J = \frac{\Omega p}{kT} \Rightarrow \sigma_J = n_J \sigma \approx 0.02 \text{ см}^{-1} \quad (18)$$

Мощность

$$P = P_0 \exp(-\sigma_J l) \approx 17 \text{ мВт} \quad (19)$$

Задача 7

Лазерное излучение мощностью 1 Вт периодически, в течение 10^{-2} с, направляется в кювету с газом длиной $l = 10$ см и объемом 50 см^3 , с плотностью числа поглощающих молекул (сечение поглощения $\sigma = 10^{-16} \text{ см}^2$) $2.5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$. Молекулы имеют 3 поступательных и 3 вращательных степени свободы. Пренебрегая излучательными переходами, оценить амплитуды прироста давления в кювете и сигнала микрофона при чувствительности микрофона 10 мВ/Па .

На один импульс излучения:

$$E_0 = P\tau \quad (20)$$

За единицу времени их:

$$\frac{dN_{reac}}{dt} = \sigma n \frac{V}{S} \frac{dN_p}{dt} \quad (21)$$

Для N_p мы можем записать:

$$\frac{dN_p}{dt} = \frac{P}{\hbar\omega} \quad (22)$$

Для поглощенного излучения:

$$P = P_0(1 - \exp[-\sigma nl]) \quad (23)$$

Для поглощенной энергии:

$$E = P_0(1 - \exp[-\sigma nl]) \cdot \tau \quad (24)$$

Ну и наконец для изменения давления:

$$\Delta p = \frac{2}{3} \frac{E}{V} = \frac{2}{3} \frac{P_0(1 - \exp[-\sigma nl]) \cdot \tau}{V} \approx 29.5 \text{ Па} \quad (25)$$

Для сигнала микрофона тогда:

$$\Delta U = 0.295 \text{ В} \quad (26)$$

Задача 8

Непрерывное возбуждающее лазерное излучение $\lambda = 515 \text{ нм}$, мощность 5 Вт (Ar+-лазер) фокусируется в рассеивающий объем $1 \text{ мм}^2 \times 5 \text{ мм}$. Сечение комбинационного рассеяния детектируемых молекул $\sigma = 10^{-30} \text{ см}^2$.

Эффективность сбора сдвинутого по частоте рассеиваемого излучения на ФЭУ - 15%, квантовая эффективность фотокатода ФЭУ - 20%, темновой ток ФЭУ - 10 фотоэлектрон/с.

Оценить минимально обнаружимую концентрацию детектируемых молекул [мол/см³], положив минимальное отношение сигнал/шум равным 2.

Темновой ток 10 фотоэлектрон/с, т.е. с учетом соотношения и эффективности на фотокатод поступает 100 фотоэлектрон/с.

На рассеивающий объем попадает мощность:

$$P = \frac{dN_f}{dt} h\nu = \frac{dN_f}{dt} \frac{hc}{\lambda} \Rightarrow \frac{dN_f}{dt} = \frac{\lambda P}{hc} \quad (27)$$

Для рассеянных:

$$\frac{dN_d}{dt} = \sigma n V j_f = \sigma n \frac{V}{S} \frac{dN_f}{dt} = \left[\frac{V}{S} = l = 5 \text{ мм} \right] = \sigma nl \frac{dN_f}{dt} = \sigma nl \frac{\lambda P}{hc} \quad (28)$$

С другой стороны, согласно условия, мы можем записать:

$$\frac{dN_d}{dt} = \frac{100}{15\%} \text{ фотоэлектрон/с} \quad (29)$$

Тогда для концентрации мы можем записать:

$$n = \frac{dN_d}{dt} \frac{hc}{\sigma l \lambda P} \approx 10^{20} \text{ м}^{-3} \quad (30)$$