

N₂O 分子 10 μm 波段谱线的位移

虞海平 沈珊雄 郑一善

(华东师范大学物理系)

本文从实验和理论两方面研究了 N₂O 分子差频带 $\nu_3 - \nu_1$ 中各不同振转谱线的压力位移。谱线压力位移比谱线半宽度小二至三个量级。用半经典 Anderson-Tsao-Curnutte 理论计算 N₂O 分子时, 发现对于线性分子的 N₂O, 其一阶位移为零, 人们想当然地认为二阶结果一定比一阶结果小, 因此 N₂O 分子的位移量一直无人研究。事实上 N₂O 位移量是存在的, 它的 A. T. O. 二阶结果并不为零。根据 A. T. O. 理论, 二阶位移由下式决定:

$$\Delta\gamma_{if} = \frac{n\bar{v}}{2\pi c} \sum_{J_i} \rho(J_i) \sigma_{if, J_i}, \quad (1)$$

其中 n 为一个大气压下分子数密度, \bar{v} 为平均相对速度, $\rho(J_i)$ 为扰动分子分布函数,

$$\sigma_{if, J_i}(b) = \pi \int_{b_0}^{\infty} 2b \cdot S_{if, J_i}(b) db, \quad (2)$$

式中

$$S_{if, J_i}(b) = \frac{C_n}{\hbar^2 v^2 b^n} \left\{ \sum_{j, i'} |\langle i | Q_1 | i' \rangle|^2 |\langle J_2 | Q_2 | J'_2 \rangle|^2 \tilde{f}(k_i) \right. \\ \left. - \sum_{j, f'} |\langle f | Q_1 | f' \rangle|^2 |\langle J_2 | Q_2 | J'_2 \rangle|^2 \tilde{f}(k_f) \right\} \quad (3)$$

为碰撞算符, 是碰撞半径 b 的函数。 C_n 为相互作用常数, 对于偶极-偶极互作用, $n=4$, $C_4 = \frac{4}{9}$; 偶极-四极互作用, $n=6$, $C_6 = \frac{4}{45}$; 四极-四极相互作用, $n=8$, $C_8 = \frac{1}{25}$ 。 i 为始态, f 为终态。 Q_1 为辐射分子相互作用算符, Q_2 为扰动分子相互作用算符。 k 为共振因子, $\tilde{f}(k)$ 为共振函数。根据这些理论公式, 我们编写了 Fortran 语言计算程序, 对 N₂O 分子差频带 $\nu_3 - \nu_1$ 中 P 支和 R 支各 50 条谱线作了计算。结果有正有负, 正值表示紫移, 负值表示红移。

实验测试在 10 米长多程试样池进行。用 He-Ne 激光作导光, 调整 N₂O 激光光路, 使 N₂O 激光通过试样池的光程达 80 m。N₂O 激光在经试样池前后都用钽酸锂探测器接收。调节 N₂O 激光器的选支光栅, 求出 10 μm 波段不同支线经过试样池的吸收系数。根据试样池内气压情况, 吸收系数应具洛伦兹线型。经最小二乘方拟合, 得到 N₂O 各不同振转谱线的压力位移量。结果与理论值比较如下(单位为 cm⁻¹):

P(10), -0.195×10^{-3} , 0.669×10^{-3} (前者是实验值, 后者为理论值); P(15), -0.247×10^{-3} , -0.234×10^{-3} ; P(18), -0.632×10^{-3} , 0.672×10^{-6} ; P(24), -0.143×10^{-3} , -0.196×10^{-3} ; P(29), -0.813×10^{-3} , -0.742×10^{-3} ; R(10), -0.213×10^{-3} , 0.507×10^{-3} ; R(16), -0.544×10^{-3} , 0.145×10^{-2} ; R(20), -0.139×10^{-3} , -0.144×10^{-2} ; R(27), -0.909×10^{-3} , -0.993×10^{-3} ; R(29), -0.351×10^{-3} , -0.362×10^{-3} 。

本工作受中国科学院(83)科基金准字第 430 号资助。