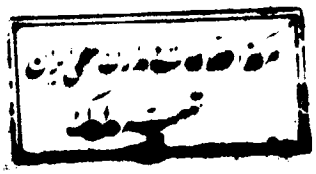
۳۴۸۰۴۴/۲۰



دانشگاه شهید بهشتی
دانشکدهٔ علوم
گروه فیزیک

۲۵

پایان نامه کارشناسی ارشد فیزیک
(گرایش لیزر)

طراحی و ساخت لیزر دی اکسید کربن موجبر با برانگیزش امواج رادیویی و سرمایش نفوذی

استاد راهنما:
دکتر حمید لطیفی

دانشجو:
علی پناهپور

۱۳۷۷

2043/2
۲۵۰۵۹

بنام خدا

تقدیم به همهٔ دوستان عزیز و اساتید ارجمندی که در مراحل مختلف انجام این پروژه اینجانب را یاری نمودند. از جمله استاد ارجمند جناب آقای دکتر لطیفی، آقای دکتر شکری، آقای مهندس عباسی همدانی، آقای مهندس کیوانفر، آقای مهندس حریر فروش و نیز دوستان بسیار عزیزم آقایان: قربانعلی توسلی، محمدرضا اسلامی، داود لطفی، هادی طبسی، بیوک یونسی، عباس اسلامی، عبدالعظیم اخشم، حسن دولتی، عابدی، شاکری، معصوم، قمی، بابایی، قاسمی، احمدیان، متین و نصیر زاده ...

۲۵۰۵۹

چکیده :

در این پایان نامه ابتدا با بررسی فرآیندهای واهلش[۱] و مدل پنج دمایی لیزر Co_2 و معرفی یک مدل میکروسکوپیک برای لیزر Co_2 موجبر با برانگیزش RF و سرمایش نفوذی،[۲] نتایج محاسبات این مدل نظری مورد مطالعه قرار گرفته است. در ادامه با بررسی پدیده شناختی[۳] تخلیه خازنی با امواج رادیویی،[۴] نواحی مختلف منحنی مشخصه این تخلیه، مربوط به مُدهای آلفا و گاما و شرایط ایجاد این مدها به تفصیل مورد مطالعه قرار گرفته است. همچنین روابطی تجربی برای پارامترهای الکتریکی تخلیه در مدهای آلفا و گاما معرفی شده‌اند. آنگاه با طرح نظریه تحلیل ابعادی[۵] و قوانین تشابه،[۶] روش طراحی این نوع لیزرها ارائه شده است و پارامترهای خارجی لیزر ساخته شده بدست آمده‌اند. در اخر با استفاده از نظریه خطوط انتقال،[۷] به طراحی القاگرهای یکنواخت کننده ولتاژ در امتداد الکترودهای لیزر و نیز شبکه تطبیق امپدانس[۸] و ژنراتور RF پرداخته‌ایم.

---

۱) relaxation
۲) diffusion cooled
۳) phenomenology
۴) Radio freq. capacitive discharge
۵) Dimensional Analysis
۶) similarity laws
۷) Transmission lines
۸) Impedance matching

عنوان	فهرست موضوعی	صفحه

فصل اول: فرآیندهای واهلش در گازها

۱.۱ - تعریف زمان واهلش ۱

۲.۱ - مبادله انرژی بین درجات آزادی داخلی و خارجی ۱

۳.۱ - تعریف دمای ارتعاشی موثر ۲

۴.۱ - ضرایب آهنگ ۳

۵.۱ - معادلات آهنگ ۶

۶.۱ - زمانهای واهلش در برخوردهای شامل دو مُد ارتعاشی غیرتشدیدی ۸

فصل دوم: معادلات واهلش در لیزر CO_2 و مدل چند دمایی

۱.۲ - مدهای ارتعاشی مولکول CO_2 ..... ۱۳

۲.۲ - انتقال انرژی V-T برای مدهای کششی متقارن و خمشی: τ_{10} , τ_{20} ۱۶

۳.۲ - انتقال انرژی V-V بین مدهای نامتقارن CO_2 و مولکول N_2 : τ_{43} ۱۶

۴.۲ - انتقال انرژی V-V میان سه مدار ارتعاشی CO_2 : τ_3 ..... ۱۹

۵.۲ - انتقال انرژی تشدیدی V-V بین مدهای متقارن و خمشی CO_2 : τ_{12} ۲۱

۶.۲ - تغییر زمانی شدت میدان کاواک ، I_η ۲۳

۷.۲ - خلاصه معادلات یک مدل پنج دمایی ۲۹

۸.۲ - تحول دمای محیط ، T ۳۱

عنوان	فهرست موضوعی	صفحه

فصل سوم: بررسی نظری لیزر CO_2 موجبر با برانگیزش RF و سرمایش رسانشی یا نفوذی

۱.۳ - معادلات پلاسما ۳۳

۲.۳ - نتایج محاسبه پارامترهای تخلیه ۴۲

۳.۳ - مدلسازی پارامترهای لیزر ۴۷

۴.۳ - مدل کنتیکی برای محاسبه ضریب بهره سیگنال کوچک و شدت اشباع ۴۸

فصل چهارم: بررسی پدیده شناختی تخلیه خازنی، با امواج رادیویی

۱.۴ - اولین ضریب یونش تانسند، α ۵۱

۲.۴ - دومین ضریب یونش تانسند، γ ۵۳

۳.۴ - برخی مزیت های استفاده از RFCD در لیزر CO_2 ..... ۵۸

۴.۴ - بررسی RFCD و مدهای α و γ ۶۰

فصل پنجم: طراحی لیزر

۱.۵ - نظریه تحلیل ابعادی ۷۸

۱.۱.۵ - نظریه باکینگهام ۷۹

۲.۵ - تعریف شباهت ۸۱

۳.۵ - ارتباط تشابه و نظریه تحلیل ابعادی ۸۱

۴.۵ - قوانین تشابه برای لیزر CO_2 موجبر با تحریک عرضی RF و سرمایش نفوذی ۸۱

۵.۵ - استفاده از قوانین تشابه ۸۳

عنوان	فهرست موضوعی	صفحه

فصل ششم : طراحی اجزای الکترونیکی

۱.۶ - یکنواخت سازی ولتاژ روی الکترودهای تخلیه ۹۲

۲.۶ - شبکه تطبیق امپدانس ۱۰۰

۳.۶ - ژنراتور RF ۱۰۶

فصل اول

۱) فرآیندهای واهلش (Relaxation) در گازها [1]

فرآیندهایی که از طریق آنها انرژی بین ترازهای برانگیخته مبادله می‌شود فرآیندهای واهلش نامیده میشوند. در این بخش پدیده واهلش را بعنوان مقدمه‌ای برای بررسی مدل چند دمایی مطالعه می‌کنیم.

۱.۱) تعریف زمان واهلش

اگر جسمی را در یک مایع وشکسان (viscous) رها کنیم پس از مدتی سرعت آن، صرفنظر از مقدار اولیه‌اش، به یک مقدار ثابت، خواهد رسید. این پدیده واهلش به وسیله معادله زیر توصیف می‌شود:

$$-(dv/dt)=(v-v_0)/\tau \qquad (۱.۱)$$

که در آن τ معیاری از وشکسانی مایع است و v_0 سرعت نهایی جسم است (مقدار تعادلی v)، که مستقل از زمان فرض می‌شود. با فرض آنکه سرعت اولیه جسم صفر باشد از حل معادله خواهیم داشت:

$$v= v_0(۱ - e^{-(t/\tau)}) \qquad (۲.۱)$$

بنابراین تغییر در سرعت نسبت به حالت تعادل چنین است:

$$(v_0 - v(t)) / v_0 = e^{-t/\tau} \qquad (۳.۱)$$

زمان لازم برای تغییر نسبی سرعت تامقدار $0.37 \cong e^{-1}$، زمان واهلش (τ) نامیده می‌شود.

۲.۱) مبادله انرژی بین درجات آزادی داخلی و خارجی

اگر ذرات درجه آزادی داخلی داشته باشند و انرژی متوسط درونی آنها E باشد، این انرژی درونی می‌تواند با انرژی انتقالی (درجه آزادی خارجی) آنها، که با دمای T مشخص می‌شود، در حال تعادل قرار گیرد. فرض کنیم مقدار انرژی درونی E ذرات در حالتی که درجه آزادی خارجی آنها در دمای T است، E (T) باشد. اگر انرژی انتقالی افزایش یابد (مثلاً توسط حرکت یک پیستون در داخل سیلندر گاز)، مقدار

انرژی درونی در حالت تعادل ((E (T') با این انرژی انتقالی جدید، مقدار بزرگتری خواهد داشت. بنابراین انرژی باید از درجه آزادی خارجی به درجه آزادی داخلی منتقل شود. این انتقال فقط از طریق برخورد و پس از صرف یک مدت زمان معین صورت می‌گیرد. مدت زمانی که در آن اختلاف نسبی انرژی درونی،

$$(E(T') - E) / E(T') \qquad (۴.۱)$$

تامقدار e^{-1}، کاهش می‌یابد، زمان واهلش نامیده می‌شود که با معادله واهلش زیر نشان داده می‌شود:

$$-(dE / dt) = (E - E(T')) / \tau \qquad (۵.۱)$$

در مدلی که بررسی می‌کنیم معادلات آهنگ لیزر برحسب انتقال انرژی‌های ذخیره شده در درجات آزادی گوناگون ذرات نوشته می‌شوند. بنابراین ابتدا چگالی‌های انرژی درونی در درجات آزادی گوناگون و زمانهای واهلش در انواع فرآیندهای واهلش را برحسب ویژگیهای فیزیکی مولکولها یا اتمها و دمای تعادل محاسبه می‌کنیم.

۳.۱) تعریف دمای ارتعاشی مؤثر

ترازهای یک نوسانگر هماهنگ ساده (SHO) با $\varepsilon_\lambda=(\lambda + ۱/۲)h\nu$ نشان داده می‌شوند و تابع پارش، (Partition function) وقتی انرژی‌های داخلی و خارجی در یک دمای محیط ویژه T^* در حالت تعادل باشند، عبارتست از:

$$Z=\sum_{\lambda=۰}^{\infty} \exp\left(\frac{-\varepsilon_\lambda}{kT^*}\right) = \sum_{\lambda} \exp\left[\frac{-(\lambda+\frac{۱}{۲})h\nu}{kT^*}\right]$$

$$= exp\left(\frac{-h\nu}{۲kT^*}\right) \quad \Sigma_\lambda exp\left(\frac{-\lambda h\nu}{kT^*}\right)$$

$$= exp\left(\frac{-h\nu}{۲kT^*}\right) \left[۱ - exp\left(\frac{-h\nu}{kT^*}\right)\right]^{-۱} \qquad (۶.۱)$$

اگر N نوسانگر در واحد حجم داشته باشیم، تعداد در واحد حجم در حالت λ در این دمای تعادل (T^*) چنین است:

$$\overset{*}{n}_{\lambda} \equiv n_{\lambda}(T^*) = N \frac{exp\left[-(\lambda + ۱/۲)(h\nu/kT^*)\right]}{Z} \qquad (۷.۱)$$

و انرژی ارتعاشی درونی کل در واحد حجم، در دمای تعادل T^*، خواهد بود:

$$\varepsilon(T^*) = \Sigma_{\lambda} (\lambda + \tfrac{۱}{۲})\, h\nu\, n_{\lambda}(T^*)$$

$$= \tfrac{۱}{۲} Nh\nu + Nh\nu[\exp(\frac{h\nu}{kT^*}) - ۱]^{-1} \qquad (۸.۱)$$

که برای بدست آوردن آن از فرمول زیر استفاده شده است:

$$۱ + x + ۲x^۲ + ۳x^۳ + \ldots = x(۱ - x)^{-2}$$

می‌توانیم انرژی درونی در واحد حجم در حالت تعادل در دمای T^* را چنین تعریف کنیم:

$$E(T^*) = Nh\nu\,[\exp(h\nu / kT^*) - ۱]^{-1} \qquad (۹.۱)$$

که می‌توان از آن، بطور معکوس برای تعریف یک دمای ارتعاشی موثر برحسب هر انرژی درونی E_a استفاده کرد:

$$T_a \equiv \frac{h\nu / k}{Ln(Nh\nu / Ea + ۱)} \qquad (۱۰.۱)$$

(۴.۱) ضرایب آهنگ (Rate Coefficients)

احتمال آنکه یک مولکول سرعتی بین v و v+dv داشته باشد صرفنظر از جهت آن می‌تواند به وسیله یک تابع توزیع توصیف شود که فعلاً فرض می‌کنیم ماکسولی باشد:

$$X(v)dv = ۴\pi (\frac{\mu}{۲\pi kT})^{۳/۲} v^۲ \exp(-\mu v^۲ / kT)\, dv \qquad (۱۱.۱)$$

که در آن μ جرم مولکول است. همچنین فرض می‌کنیم برخورد بین دو ذره عبارتست از هر تغییر فیزیکی در هریک از دو ذره یا تغییر در اندازه حرکتشان در نتیجه مجاورت آنها باهم. مانند برخورد بین دو توپ سخت می‌توان یک ناحیه موثر مجازی برای یک هدف (target) تعریف کرد، طوریکه هرگاه ذره ای از این ناحیه عبورکند، برخوردی رخ داده باشد. این ناحیه موثر مجازی (سطح مقطع برخورد) معیاری است از احتمال برخورد بین اجزای مختلف گاز. وقتی ذرات برخوردی یکسان نباشند، μ جرم کاهیدهٔ (reduced mass) دو ذره می‌باشد. فرض کنیم در یک گاز می‌تواند چندین نوع مولکول وجود داشته

باشد و $\sigma_{if}(v)$ سطح مقطع یک برخورد بین مولکولها باشد (با سرعت نسبی v) که در آن حالتهای اولیه و نهایی به ترتیب با i و f نشان داده شود. آهنگی که مولکولهای باسرعت بین v و v+dv صرفنظر از جهتشان از ناحیه مؤثر $\sigma_{if}(v)$ عبور می‌کنند چنین است:

$$v\sigma_{if}(v)\ X(v)dv \qquad (۱۲.۱)$$

ضریب آهنگ با انتگرال گیری از این عبارت روی تمام سرعتهای نسبی بدست می‌آید:

$$K_{if}(T) = ۴\pi \int_{o}^{\infty} \sigma(v) \left(\frac{\mu}{۲\pi kT}\right)^{\frac{۳}{۲}} v^{۳} \exp(-\mu v^{۲}/۲KT)\ dv \qquad (Cm^{۳}Sec^{-۱}) \qquad (۱۳.۱)$$

فرض کنیم N(T) تعداد ذرات در واحد حجم در دمای T باشد. سه مورد را بررسی می‌کنیم:

الف: گاز شامل یک نوع ذره، مثلاً Co-Co:

فرض کنیم تعداد مولکول در واحد حجم در حالت i، n_i باشد. برخوردها فقط می‌توانند بین ذرات مشابه رخ بدهند که یکی از آنها بدون ساختار (Structureless) فرض می‌شود و بنابراین تعداد مولکولهایی که در واحد حجم در واحد زمان از حالت i به حالت f گذار می‌کنند عبارتند از: Nn_ik_{if}

ب: گاز شامل دو نوع ذره است - ذره فرودی بدون ساختار فرض می‌شود:

(Structureless projectile)

بعنوان مثال He و HF را درنظر بگیرید. در این مورد دو ضریب آهنگ می‌توان بکار برد:

$$K_{if}^{HF} \quad , \quad K_{if}^{He}$$

که در آن مولکول HF بعنوان هدف می‌تواند در اثر برخورد با یک مولکول HF و یا یک اتم He از حالت i به حالت f برود. بنابراین اگر n_i چگالی تعداد مولکولهای HF در حالت i باشد، تعداد کل گذارها از i به f در واحد حجم و در واحد زمان خواهد بود:

$$N_{HF}\, n_i\, k_{if}^{HF} + N_{He} n_i\, k_{if}^{He} \qquad (۱۴.۱)$$

شکل عمومی این معادله چنین است: (۱۵.۱)

$$N\nu_{ij} = n_i \sum_{t=۱}^{C} N_t\, k_{if}^{t}$$

$$N = \sum_{t=1}^{C} N_t$$

که در آن C تعداد انواع ذرات درگاز را نشان می‌دهد و N_t/N تجمع نسبی ذرات مختلف است و بُعد , ϑ_{ij} ، $(Sec^{-1})T^{-1}$ است.

ج: حالت هر دو ذره برخوردی تغییر می‌کند:

گازی را شامل دو نوع مولکول که به ترتیب مُدهای ارتعاشی آنها با λ و ℓ مشخص شود در نظر می‌گیریم. فرض کنیم $n_{\lambda i}$ و m_{li} تعداد ذرات در واحد حجم در حالتهای اولیه λ_i و l_i باشند. تعداد ذرات در واحد حجم در واحد زمان که گذار $\lambda_i \ell_i \longrightarrow \lambda_f \ell_f$ را انجام دهند خواهد بود:

$$n_{\lambda i}\, m_{li}\, k_{\lambda i \ell i\,,\,\lambda f\, \ell f} \qquad (۱۶.۱)$$

با استفاده از نظریه برخوردهای مولکولی (Distorted Wave Theory of Molecular Collisions) و حل معادله شرورینگر برای هامیلتونی مربوط به برخورد دو نوسانگر هماهنگ ساده، می‌توان عبارتی برای سطح مقطع برخورد غیرالاستیک دو نوسانگر به دست آورد که با استفاده از آن روابط زیر بین ضرایب آهنگها براحتی اثبات می‌شود، که از آنها در قسمتهای بعدی استفاده خواهد شد:

$$k_{\lambda\lambda+1} = (\lambda+1)\, k_{0,1} \qquad k_{\kappa\lambda\,,\,\kappa-1\lambda+1} = \kappa(\lambda+1)\, k_{10,01} \qquad (۱۷.۱)$$

$$k_{\lambda\lambda-1} = \lambda k_{10} \qquad k_{\kappa\lambda\,,\,k+1\,\lambda-1} = (\kappa+1)\, \lambda k_{01,10}$$

$$k_{\kappa\lambda\,,\,\kappa\lambda+1} = (\lambda+1)\, k_{00,01} \qquad k_{\lambda\ell\,,\,\lambda+1\,\ell-2} = (\lambda+1)\, \ell\, (\ell-1) k_{02,10}$$

$$k_{\kappa\lambda\,,\,\kappa\lambda-1} = \lambda k_{01,00} \qquad k_{\lambda\ell\,,\,\lambda-1\,\ell+2} = \lambda\, (\ell+1)(\ell+2) k_{10,02}$$

$$k_{\kappa\lambda\,,\,\kappa+1\lambda} = (k+1)\, k_{00,10} \qquad k_{\ell\lambda\mu\,,\,\ell+1\,\lambda-1\,\mu-1} = (\ell+1)\lambda\, \mu k_{011,100}$$

$$k_{\kappa\lambda\,,\,\kappa-1\lambda} = k_{10,00} \qquad k_{\ell\lambda\mu\,,\,\ell-1\,\lambda+1\,\mu+1} = \ell\, (\lambda+1)(\mu+1) k_{100,011}$$

$$k_{020,100} = k_{100,020}$$

(۵.۱) معادلات آهنگ - ذره فرودی بدون ساختار و SHO

فرض کنیم n_i تعداد ذرات در واحد حجم در حالت i باشد در حالیکه گاز در دمای T قرار دارد. پس $Nn_ik_{if}(T)$ تعداد کل برخوردهای موثر در واحد حجم در واحد زمان خواهد بود که ذرات را از حالت i حالت f می‌برد. آهنگ تغییر در جمعیت حالتهای i یعنی dn_i/dt، جمع جبری عبارتهایی مثل Nn_ik_{ij} (که از جمعیت حالت i می‌کاهد) و Nn_jk_{ji} (که به انبوهی حالت i می‌افزاید) خواهد بود. اکنون برخورد بین یک ذره فرودی بی‌ساختار و یک مولکول هدف که یک نوسانگر هماهنگ ساده است را درنظر بگیرید. فرض خواهیم کرد گذارها فقط به حالتهای مجاور یعنی $j-1 \longrightarrow j$ و $j \longrightarrow j+1$ امکانپذیر است. آهنگ تغییر انبوهی حالت j خواهد بود:

$$-\frac{dnj}{Ndt} = n_j\,[k_{jj+1}(T) + k_{jj-1}(T)] - n_{j-1}\,k_{j-1j}(T) - n_{j+1}\,k_{j+1j}(T) \qquad (۱۸.۱)$$

که در آن T دمای گاز در محیط است. وقتی سیستم در دمای T^* به تعادل حرارتی برسد طرف چپ معادله بالا صفر خواهد شد که انبوهی تعادلی n_j^* را خواهد داد:

$$O = n_j^*\left[k_{jj+1}(T^*) + k_{jj-1}(T^*)\right] - n_{j-1}^*\,k_{j-1j}(T^*) - n_{j+1}^*\,k_{j+1j}(T^*) \qquad (۱۹.۱)$$

از آنجا که پایین ترین حالت فقط به اولین حالت بالایی گذار خواهد کرد داریم:

$$O = n_0^*\,k_{01}(T^*) - n_1^*\,k_{10}(T^*) \qquad (۲۰.۱)$$

که تساوی‌هایی دو جمله ای از معادلهٔ (۱۹.۱) بدست می‌دهد:

$$O = n_j^*\,k_{jj+1}(T^*) - n_{j+1}^*\,k_{j+1j}(T^*)$$

و یا:

$$\frac{k_{jj+1}(T^*)}{k_{j+1j}(T^*)} = \frac{n_{j+1}^*}{n_j^*} = \frac{exp\left[-(j+\frac{3}{2})\,h\nu/kT^*\right]}{exp\left[-(j+\frac{1}{2})\,h\nu/kT^*\right]}$$

که در آن از معادله (۷.۱) استفاده شده است. بنابراین رابطه مهم زیر را بدست می‌آوریم:

$$\frac{k_{jj+1}(T^*)}{k_{j+1j}(T^*)} = exp\left(\frac{-h\nu}{kT^*}\right) = \kappa(T^*) \qquad (۲۱.۱)$$

که یک تساوی برحسب T^* است و چون گاز در هر دمایی (دمای محیط) می‌تواند به حالت تعادل برسد می‌توان نوشت:

$$\frac{k_{jj+1}(T)}{k_{j+1j}(T)} = e^{-h\nu/kT} = \kappa(T)$$

که با استفاده از روابط (۱۷.۱) آنرا بدین صورت می‌نویسیم:

$$k_{01}(T) = k_{10}(T)e^{-h\nu/kT} = k_{10}(T)\,\kappa(T) \qquad (۲۲.۱)$$

با استفاده از روابط (۱۷.۱) و (۲۲.۱) ، معادله (۱۸.۱) بصورت زیر خواهد بود:

$$-\frac{dn_j(T)}{Ndt} = n_j[\kappa(j+1)\,k_{10}(T) + jk_{10}(T)] - n_{j-1}\kappa jk_{10}(T) - n_{j+1}(j+1)\,k_{10}(T)$$

$$\frac{dn_j}{Ndt} = k_{10}(T)[\kappa j\,n_{j-1} - jn_j - \kappa(j+1)\,n_j + (j+1)n_{j+1}] \qquad (۲۳.۱)$$

اگر دو طرف معادله بالا را در $h\nu_j$ ضرب کنیم و روی j جمع ببندیم، با تغییر متغیر j+۱=j' و استفاده از روابط $\sum_{j=0} n_j = N$ و $E=\sum_j jh\nu n_j$ (انرژی درونی کل در واحد حجم) خواهیم داشت:

$$\frac{dE}{Ndt} = -k_{10}(T)(1-\kappa)\,[E - \kappa h\nu N\,(1-\kappa)^{-1}] \qquad (۲۴.۱)$$

از طرفی می‌توان نوشت: $kh\nu N(1-\kappa)^{-1} = Nh\nu\,(e^{h\nu/kT}-1)^{-1} = E(T)$

که در آن مقدار κ از رابطه (۲۱.۱) جایگذاری شده و E(T) انرژی درونی تعادلی در دمای T است که در رابطهٔ (۹.۱) تعریف شده است. بنابراین معادله (۲۴.۱) را می‌توان بصورت زیر نوشت:

$$-dE/dt = [E - E(T)]/\tau(T) \qquad (۲۵.۱)$$

که زمان واهلش بدینصورت تعریف شده است: $\tau^{-1} = Nk_{10}(T)\,(1-\kappa)$ (۲۶.۱)

Schwartz و دیگران فقط $\mu = ۰،۱$ را درنظرمی‌گیریم. آهنگ کلی تغییر انرژی درونی مولکولهای نوع a در واحد حجم از جمع عبارتهای بالا بدست می‌آید:

$$\frac{d(aE_a)}{dt} = h\nu_a \left[\sum_{\lambda\lambda'} n_\lambda n_{\lambda'} (k_{\lambda\lambda', \lambda+1\lambda'} - k_{\lambda\lambda', \lambda-1\lambda'}) \right. \tag{۲۹.۱}$$

$$\left. + \sum_{\lambda l} n_\lambda m_l (\bar{k}_{\lambda l, \lambda+1 l} - \bar{k}_{\lambda l, \lambda+1 l} + \bar{k}_{\lambda l, \lambda+1 l-1} - \bar{k}_{\lambda l, \lambda-1 l+1}) \right]$$

با استفاده از روابط (۱۷.۱) بین ضرایب آهنگها خواهیم داشت:

$$\frac{d(aE_a)}{dt} = h\nu_a \left[\sum_{\lambda\lambda'} n_\lambda n_{\lambda'} (\lambda+1) k_{..,1.} - \lambda k_{1.,..} \right] \tag{۳۰.۱}$$

$$+ \sum_{\lambda l} n_\lambda m_l ((\lambda+1) \bar{k}_{..,1.} - \lambda \bar{k}_{1.,..} + (\lambda+1) l \bar{k}_{.1,1.} - \lambda (l+1) \bar{k}_{1.,.1})$$

۱.۶.۱) برخورد بین SHOهای غیرمشابه

با استفاده از روابط:

$$\sum_\lambda n_\lambda = aN \tag{۳۱.۱}$$

$$\sum_l m_l = bN \tag{۳۲.۱}$$

$$\sum_\lambda n_\lambda \lambda h\gamma_a = aE_a \tag{۳۳.۱}$$

$$\sum_l m_l l h\gamma_b = bE_b \tag{۳۴.۱}$$

۶.۱) زمانهای واهلش در برخوردهای شامل دو مُد ارتعاشی غیرتشدیدی (Nonresonant)

فرض کنیم E_a انرژی درونی N مولکول از نوع "a" در واحد حجم باشد. اگر a نشان دهندهٔ مقدار نسبی مولکولهای از نوع a باشد: aE_a انرژی درونی در واحد حجم aN مولکول خواهد بود. فرض کنیم انتقال انرژی به مولکولهای نوع a از طریق برخورد آنها با خودشان و نیز با مولکولهایی از نوع b صورت گیرد در حالیکه : $a+b=1$

تعداد مولکولهای نوع a در حالت λ که در اثر برخورد با مولکولهای مشابه در حالت λ' (که در همین حالت λ' باقی می‌مانند) به حالت $\lambda+1$ گذار می‌کنند در واحد حجم و زمان عبارتست:

$$n_\lambda n_{\lambda'} k_{\lambda\lambda',\,\lambda+1\,\lambda'}(T)$$

این عبارت برخوردهای T-v را نشان می‌دهد که منجر به افزایش انرژی درونی می‌شوند. گذاری‌های متناظر v-T که منجر به کاهش انرژی درونی می‌شوند بدین صورت نشان داده می‌شوند:

$$n_\lambda n_{\lambda'} k_{\lambda\lambda',\,\lambda-1\lambda'}(T)$$

در حالت کلی عبارتهایی که نشان دهندهٔ تغییر در انرژی درونی به اندازهٔ $h\vartheta_a$ می‌باشند عبارتند از:

$$n_\lambda\, n_\lambda\, (k_{\lambda\lambda',\,\lambda+\mu\;\lambda'-\mu+1} - k_{\lambda\lambda',\;\lambda-\mu\,\lambda'+\mu-1}) \qquad (۲۷.۱)$$

که در اولین عبارت $\mu \le \lambda'+1$ و در دومی $\mu \le \lambda$ می‌باشد. ما در اینجا به پیروی از Schwartz، از همهٔ عبارتها بجز عبارتهایی که در آنها $\mu=1$ است، صرفنظر می‌کنیم.

همچنین انرژی درونی مولکولهای نوع a در اثر برخورد با مولکولهای نوع b که حالتهایشان را با زیرنویس l نشان می‌دهیم تغییر می‌کند. تعداد مولکولهای نوع a در واحد حجم و زمان که موجب تغییر انرژی درونی به اندازهٔ $h\nu_a$ در اثر برخورد با مولکولهای نوع b می‌شوند عبارتست از:

$$n_\lambda m_l\, (\bar{k}_{\lambda l,\,\lambda+1\,l-\mu} - \bar{k}_{\lambda l,\,\lambda-1\,l+\mu}) \qquad (۲۸.۱)$$

که در آن از $\bar{k}$ استفاده شده تا برخوردهای a-b از برخوردهای a-a متمایز شوند و m_l/N کسر مولکولهای نوع b در حالت l را نشان می‌دهد. وقتی $\mu=0$ باشد، گذارهای v-T را خواهیم داشت و وقتی $\mu\neq0$ باشد ضرایب آهنگ از سطح مقطع‌های v-v متناظرشان محاسبه می‌شوند. باز هم به پیروی از