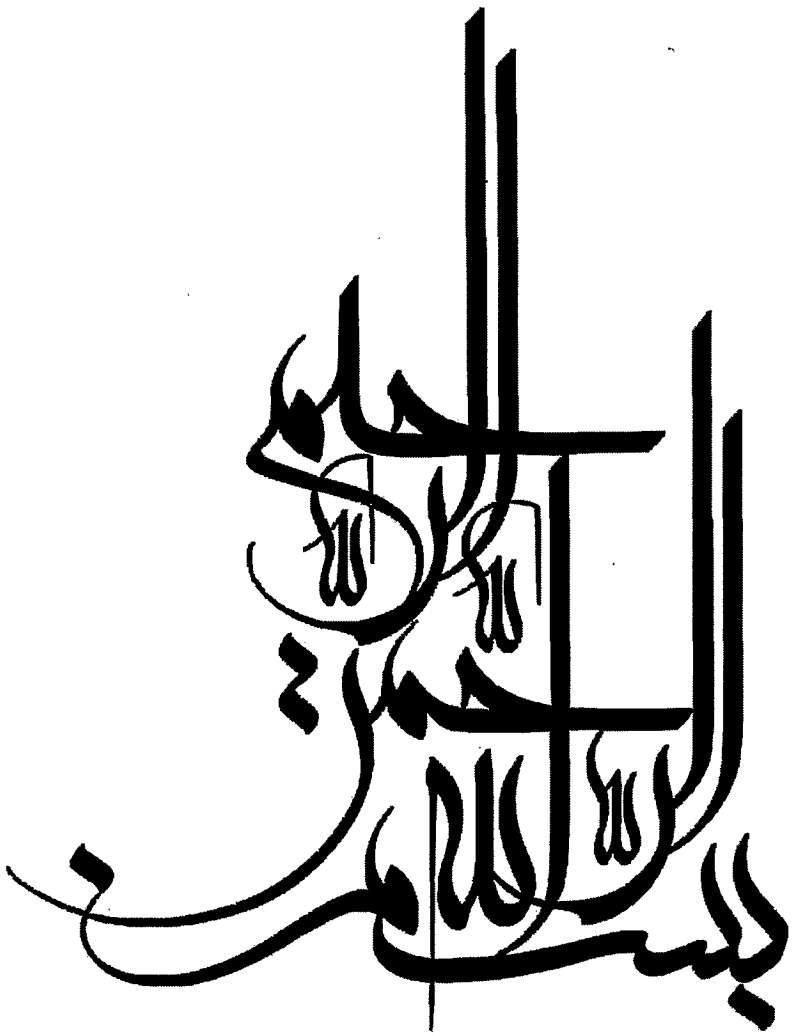
١٤٥٠٤



١٠٢٤١٤

دانشگاه تربیت مدرس

دانشکده علوم پایه

پایان نامه دوره کارشناسی ارشد فیزیک (اتمی-مولکولی)

عنوان

تک مدسازی طولی لیزر تپی گازکربنیک TEA به روش مشدد حلقوی

مرکز اطلاعات علمی

نگارش

سمیه پناهی بخش

۱۵۰۰۰ /۲/ ۳۲۸۷

استاد راهنما

دکتر سعید جلوانی

استاد مشاور

آقای مجید آرام

تیر ۱۳۸۶

۱۰۲۵۱۴

بسمه تعالی

تأییدیه اعضای هیأت داوران حاضر در جلسه دفاع از پایان‌نامه کارشناسی‌ارشد

اعضای هیئت داوران نسخهٔ نهایی پایان‌نامه خانم **سمیه پناهی** رشته **فیزیک** تحت عنوان: «**تک مد سازی طولی لیزر پمپی گاز کربنیک TEA به روش مشدد حلقوی**» را از نظر فرم و محتوا بررسی نموده و آنرا برای اخذ درجهٔ کارشناسی‌ارشد مورد تائید قرار دادند.

اعضای هیأت داوران	نام و نام خانوادگی	رتبهٔ علمی	امضاء
۱- استاد راهنما	آقای دکتر سعید جلوانی	استادیار	
۲- استادمشاور	آقای مهندس مجید آرام	مربی	
۳- استاد ناظر داخلی	آقای دکتر رسول ملک‌فر	استادیار	
۴- استاد ناظر خارجی	آقای دکتر پرویز پروین	دانشیار	
۵- نماینده تحصیلات تکمیلی	آقای دکتر رسول ملک‌فر	استادیار	

۱۰۲۳۱۳

بسمه تعالی

دانشگاه تربیت مدرس
دانشکده علوم پایه

آیین‌نامهٔ چاپ پایان‌نامه (رساله) های دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس

نظر به اینکه چاپ و انتشار پایان‌نامه (رساله)های تحصیلی دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس، مبین بخشی از فعالیتهای علمی - پژوهشی دانشگاه است بنابراین به منظور آگاهی و رعایت حقوق دانشگاه، دانش‌آموختگان این دانشگاه نسبت به رعایت موارد ذیل متعهد می‌شوند:

مادهٔ ۲ در صفحهٔ سوم کتاب (پس از برگ شناسنامه)، عبارت ذیل را چاپ کند

«کتاب حاضر حاصل پایان‌نامهٔ کارشناسی‌ارشد/رسالهٔ دکتری نگارنده در رشتهٔ فیزیک است که در سال ۱۳۸۶ در دانشکدهٔ علوم پایه دانشگاه تربیت مدرس به راهنمایی سرکار خانم/جناب آقای دکتر سعید حدادی، مشاورهٔ سرکار خانم/جناب آقای دکتر محمد آرام و مشاورهٔ سرکار خانم/جناب آقای دکتر از آن دفاع شده است.»

مادهٔ ۳ به منظور جبران بخشی از هزینه‌های انتشارات دانشگاه، تعداد یک درصد شمارگان کتاب (در هر نوبت چاپ) را به «دفتر نشر آثار علمی» دانشگاه اهدا کند. دانشگاه می‌تواند مازاد نیاز خود را به نفع مرکز نشر در معرض فروش قرار دهد.

مادهٔ ۴- درصورت عدم رعایت مادهٔ ۳، ۵۰٪ بهای شمارگان چاپ‌شده را به عنوان خسارت به دانشگاه تربیت مدرس ، تادیه کند.

مادهٔ ۵- دانشجو تعهد و قبول می‌کند درصورت خودداری از پرداخت بهای خسارت، دانشگاه می‌تواند خسارت مذکور را از طریق مراجع قضایی مطالبه و وصول کند؛ به علاه به دانشگاه حق می‌دهد به منظور استیفای حقوق خود، از طریق دادگاه، معادل وجهٔ مذکور در مادهٔ ۴ را از محل توقیف کتابهای عرضه‌شدهٔ نگارنده برای فروش، تأمین نماید.

مادهٔ ۶- اینجانب سعید حاجی عباس دانشجوی رشته فیزیک مقطع کارشناسی ارشد تعهد فوق و ضمانت اجرایی آن را قبول کرده، به آن ملتزم می‌شوم.

نام و نام خانوادگی: سعید حاجی عباس

تاریخ و امضا:

۱۳۸۶/۱۱/۲۰

تقدیم

به

مادر مهربانم

و

پدر عزیزم.

نگارنده بدینوسیله از زحمات و همکاری همکاران گروه لیزرهای گازی پژوهشکده لیزر سازمان انرژی اتمی ایران، بخصوص همکاران آزمایشگاه لیزر گازکربنیک آقایان مجید نظری، شهریار ابوالحسینی، خانم زهرا پورحسن نژاد و آقایان داود احدپور و کوشکی سپاسگزاری می کند..
نگارنده از همدلی استاد بزرگوار جناب آقای دکتر محمدرضا ابوالحسنی نیز تقدیر و تشکر می نماید.

چکیده

در لیزرهایی که محیط بهره پهن شده همگن دارند، به دلیل اشباع یکنواخت بهره، انتظار می رود به طور طبیعی تابش خروجی تک مد طولی ایجاد گردد؛ اما در عمل چنین چیزی مشاهده نمی گردد. این امر ناشی از وجود پدیده سوختن حفره فضایی است که با ایجاد ناهمگنی در اشباع بهره باعث می شود مدهای طولی مختلف بتوانند به طور همزمان نوسان کنند.

پدیده سوختن حفره فضایی از وجود امواج ایستاده در کاواک ناشی می شود. حذف این اثر با استفاده از کاواک موج متحرک باعث ایجاد نوسان در تک مد طولی می گردد. در نقطه مقابل کاواکهای خطی که کاواکهای موج ایستاده نیز نامیده می شوند، کاواکهای حلقوی تک جهتی به عنوان کاواک موج متحرک شناخته می شوند. در این کاواکها امواج ایستاده وجود ندارند و پدیده سوختن حفره فضایی به طور کامل حذف می شود.

می توان با استفاده از «دیود اپتیکی» نوسان تک جهتی در مشدد حلقوی ایجاد کرد. در این پروژه جاذب اشباع پذیر سولفور هگزا فلوئورید به عنوان دیود اپتیکی مورد استفاده قرار گرفته است؛ با این روش خروجی شبه تک مد طولی از لیزر گازکربنیک برانگیخته عرضی فشار جوی به دست آمده است.

لیزرهای تک مد طولی کاربردهای گسترده‌ای دارند، علاوه بر این استفاده از این لیزرها در بسیاری از آزمایشها تفسیر داده‌ها و نتایج را ساده می کند.

واژگان کلیدی: تک مد طولی، لیزر گازکربنیک برانگیخته عرضی فشار جوی، مشدد حلقوی، پدیده سوختن حفره فضایی ، جاذب اشباع پذیر، سولفور هگزا فلوئورید.

فهرست مطالب

مقدمه ۱
۱ ..... ٤
لیزرگازکربنیک ضربانی برانگیخته عرضی فشار جوی ٤
۱-۱ لیزرهای گازی مولکولی ۵
۱-۲ساختار ارتعاشی- چرخشی مولکول دی اکسید کربن ۵
۱-۳ لیزرهای گازکربنیک ۱۱
۱-۴ سیستمهای لیزری CO_2 با تحریک ضربانی ۱۹
۱-۵ لیزرهای CO_2 مبتنی بر تخلیه ضربانی طولی ۲۰
۱-۶ لیزرهای CO_2 مبتنی بر تخلیه ضربانی عرضی ۲۱
۱-۶-۱ سیستمهای تخلیه دوگانه عرضی شبه خود نگهدار با پیش یونش فرابنفش ۲۳
۱-۶-۲ پیش یونش دی الکتریک کرونا ۲۵
۱-۷ مدارهای مولد ضربان ولتاژ ۲۶
۱-۸ جمع بندی ۲۹
۲ ..... ۳۱
روشهای تک مد سازی طولی ۳۱
۲-۱ مدهای لیزری ۳۲
۲-۱-۱ مدهای طولی کاواک فابری پرو ۳۳
۲-۱-۲ مدهای عرضی ۳۶
۲-۱-۳ مد عرضی اصلی ۴۰
۲-۲ روشهای تک مد سازی طولی ۴۱
۲-۲-۱ کنترل طول مشدد ۴۲
۲-۲-۲ اتالونهای داخل کاواکی ۴۳
۲-۲-۳ جاذبهای انتخابی گازی درون مشدد ۴۶
۲-۲-۴ کاواکهای چند عنصری جفت شده ۴۷
۲-۲-۵ عناصر منشوری درون مشدد ۴۹

۲-۲-۶ روشهای انتخاب مد فعال ۵۰
۲-۲-۷ لیزر مرکب گاز کربنیک پیوسته- ضربانی TEA ۵۱
۲-۲-۸ لیزر مرکب گاز کربنیک ضربانی عرضی – ضربانی TEA ۵۲
۲-۲-۹ روش قفل شدگی تزریقی ۵۳
۲-۲-۱۰ قفل شدگی مد با تزریق موج پیوسته از یک لیزر تک مد طولی ۵۳
۲-۲-۱۱ قفل شدگی مد با تزریق شعاع لیزر ضربانی تک مد طولی ۵۵
۲-۳ کاربردهای لیزر با خروجی تک مد طولی ۵۶
۲-۳-۱ طیف سنجی لیزری ۵۶
۲-۳-۲ دمش اپتیکی لیزرهای مادون قرمز دور ۵۷
۲-۳-۳ لیدار ۵۹
۲-۴ پایدار سازی فرکانسی ۶۰
۳ ..... ۶۲
تک مد سازی طولی به روش مشدد حلقوی و نتایج تجربی ۶۲
۳-۱ کاواک حلقوی ۶۳
۳-۱-۱ مدهای طولی کاواک حلقوی ۶۵
۳-۱-۲ ویژگیهای نوسانگر لیزری حلقوی ۶۶
۳-۱-۳ شرایط پایداری کاواک حلقوی ۷۰
۳-۱-۴ کاواک حلقوی سه آینهای ۷۳
۳-۲ روش مشدد حلقوی ۷۵
۳-۲-۱ اشباع بهره پهن شده همگن ۷۸
۳-۲-۲ اثر سوختن حفره فضایی ۷۹
۳-۲-۳ نوسان تک خط ۸۲
۳-۲-۴ نوسان چند مدی ۸۳
۳-۳ جاذبهای اشباع پذیر ۸۴
۳-۳-۱ مولکول سولفور هگزا فلورید ۸۸
۳-۳-۲ جاذب اشباع پذیر سولفور هگزا فلورید ۹۰
۳-۴ آرایش تجربی ۹۲
۳-۴-۱ساختمان لیزر ۹۲
۳-۴-۲ مدار الکتریکی لیزر ۹۵

۳-۴-۳ تریگاترون ۹۶
۳-۴-۴ سلول جاذب اشباع پذیر ۹۸
۳-۴-۵ پمپ خلأ ۹۹
۳-۴-۶ فشارسنج پیرانی ۱۰۳
۳-۴-۷ آرایش مشدد حلقوی ۱۰۴
۳-۴-۸ همخط سازی کاواک حلقوی ۱۰۵
۳-۵ انجام آزمایش ۱۰۶
۳-۶ ارائه نتایج و تحلیل آزمایش ۱۰۹
۳-۷ ارائه پیشنهاد ۱۱۰
فهرست مراجع ۱۱۲

مقدمه

در سال ۱۹۶۰ میلادی میمن[1] با استفاده از یک بلور یاقوت اولین لیزر (لیزر یاقوت) را ساخت. بعد از آن انواع مختلف لیزر به سرعت، یکی پس از دیگری به عرصه تکنولوژی پا نهادند. در آن سالها پژوهشگران بسیاری روی انواع مختلف ماده به عنوان محیط تقویت کننده لیزری کار کردند؛ به طوری که در طی کمتر از دو دهه تمام لیزرهای تا کنون شناخته شده، به وجود آمدند.

پرسشی که در سالهای نخست اختراع لیزر پیش آمد، این بود که لیزر، این نور عجیب پاسخگوی کدامین نیازهای بشر است. در واقع نور لیزر هیچ گاه کاربرد نورهای معمولی را پیدا نکرد. با درک ویژگیهای مختلف نور لیزر مثل همدوسی، تکفامی، جهتمندی و غیره، کاربردهای بسیار گسترده آن نیز کم کم شناخته شدند.

برای کشف کاربردهای بیشتر نور لیزر لازم بود تا پدیده های درگیر در ایجاد نور لیزر به طور کامل توضیح داده شوند؛ بدین منظور از علومی چون اپتیک غیرخطی ، الکترواپتیک و آکوستواپتیک و مانند اینها کمک گرفته شد. در این میان قلمرو علومی مثل فیزیک لیزر، اپتوالکترونیک، فوتونیک و الکترونیک کوانتومی نیز گسترش یافتند.

از زمان اختراع لیزر نزدیک به نیم قرن می گذرد؛ از آن زمان تا کنون چه از لحاظ تحقیقات علمی محض و چه تحقیقات کاربردی و فنی از بهینه سازی عملکرد لیزر برای کاربردهای متفاوت، شامل بررسی توان خروجی، پایداری، واگرایی باریکه لیزری، ساختار مدی، شکل تپ، خلوص طیفی وغیره، تا پیدا کردن کاربردهای بیشتر و با کارایی بهتر گروههای بسیاری از دانشمندان و مهندسان بر روی انواع مختلف لیزر مطالعه کرده اند.

کاربردهای خاص هر لیزر با توجه به پارامترهای خروجی آن لیزر مشخص می شود. یکی از ویژگیهای لیزر که کاربردهای خاصی نیز دارد، تکفامی است. البته باید توجه کردکه هیچ لیزری به طور کامل تکفام نیست؛ بلکه دارای پهنای فرکانسی خاصی حول بسامد مرکزی می باشد . در هر لیزر حد تکفامی خاصی وجود داردکه با توجه به نوع پهن شدگی آن سیستم لیزری تعیین می شود. برای برخی کاربردها حد تکفامی که لیزرها به طور معمول دارا هستند، کافی نمی باشد و تجهیزات اضافی برای به دست آوردن پهنای فرکانسی باریکتر مورد نیاز است.

---

[1] *Mainman*

به فرکانسهای تشدیدی کاواک لیزری که نوسان فقط در این فرکانسها شکل می گیرد، مدهای طولی کاواک گفته می شود. اگر نوسانگر لیزری به طریقی به نوسان در تنها یک تک مد طولی وادار شود، کوچکترین پهنای فرکانسی ممکن از لیزر به دست می آید.

از میان انواع مختلف لیزرها، لیزرهای گازی به دلیل داشتن کارایی بالا، امکان انتخاب وسیع طول موجها، استقلال نسبی از شرایط محیطی و شعاع خروجی با همدوسی تقریباً ایده آل دردسترس ترین و شاید مناسب ترین نوع لیزر هستند.

امتیاز لیزرهای گازی نسبت به انواع دیگر لیزر، اغلب به این دلیل است که محیط فعال در این لیزرها،گاز، محیط کاملاً همگنی است و حتی در شرایط نامطلوب این لیزرها بازده نسبتاً خوبی دارند. شعاع خروجی بیشتر لیزرهای گازی به علت همگن بودن محیط گوسی است. ساختن این لیزرها با ابعاد بزرگ امکان تولید توان خیلی بالا را فراهم می کند.

البته بزرگ بودن این لیزرها یکی از معایب آنها محسوب می شود و اشکال دیگر آنها این است که به ولتاژ بالا برای دمش الکتریکی نیاز دارند؛ با وجود این، این لیزرها در توان و کارایی پیشگامند و در بسیاری از جنبه ها درک و تحلیل آنها از لیزرهای دیگر ساده تر است.

در گروههای متفاوت لیزرهای گازی شامل لیزرهای اتمی، یونی و مولکولی لیزر گازی مولکولی دی اکسید کربن، یکی از مهمترین لیزرها محسوب می شود. لیزر CO_2 در سال ۱۹۶۴میلادی توسط *پاتل*[1] گزارش شد. توان خروجی بالا و محدوده طول موجی این لیزر، پژوهشگران را برآن داشت تا مهمترین لیزر در امر صنعت و پزشکی به عرصه تکنولوژی پا گذارد. چندی نگذشت که اهمیت این لیزر در این دو رشته و رشته‌های دیگر آشکار گردید؛ به طوری که روزبه‌روز کاربرد این لیزر در رشته های مختلف گسترش یافت.

گسترش انواع متفاوت لیزرهای CO_2 نیز جالب توجه است. اولین لیزر CO_2 گزارش شده دارای توان خروجی پیوسته در حدود چند میلی وات بود، در حالی که امروزه لیزرهایی با خروجی پیوسته (CW)، با توان خروجی بیشتر از ۲۰ کیلو وات ساخته شده‌اند. سیستمهای ضربانی، با تپهای خروجی لیزری با انرژی چند ژول در سال ۱۹۶۸ به روی کار آمدند. گسترش این سیستمها برای طرحهای بزرگ گداخت هسته‌ای، به ساخت لیزرهایی با خروجی حدود ۱۰۰ کیلو ژول منجر گردید.

ویژگیهای بارز گروههای لیزر CO_2 که آنها را از لیزرهای دیگر متمایز می کند؛ بهره، توان خروجی و بازده بالا است. بخصوص درصد بازده توان بالای این لیزر در مقایسه با لیزرهای دیگر قابل توجه است؛ برای مثال درحالی که لیزرهای هلیوم- نئون و یون آرگون بازده حدود یک دهم درصد

---

[1] *Patel*

دارند، لیزر دی‌اکسیدکربن دارای بازده حدود ۲۰ درصد است؛ بازده لیزر CO_2 تا ۳۰ درصد نیز گزارش شده است.

در طی چهل و چند سال اخیر فیزیکدانان و مهندسان بسیاری روی گروههای متفاوت لیزر CO_2 مطالعه کرده اند. بهینه سازی لیزرهای CO_2 می تواند به چندین روش، مثل بهینه سازی بیشینه توان خروجی چند مدی قابل حصول، بیشینه توان خروجی تک مدی قابل حصول، ، بیشینه کارایی قابل حصول و کمینه کردن اندازه و پیچیدگیهای فنی آن صورت گیرد.

با توجه به کاربردهای مختلف، لیزرهای CO_2 درحالت کلی دارای عملکرد ساده، متنوع و برای ساخت و نگهداری نسبتاً ارزان هستند. در میان کاربردهای لیزر CO_2 ، کاربردهای بسیاری وجود دارد که به لیزر تک مد نیاز دارد. مواردی از قبیل برهمکنش غیرخطی لیزر با گازها و نیمرساناها، دمش نوری لیزرهای مادون‌قرمز میانی و دور، و لیدار از جمله این کاربردها هستند.

به علاوه استفاده از لیزرهایی با پهنای طیفی کوچک، برای ساده نمودن توصیف نتایج و داده ها مورد توجه قرار دارد. در این مورد می توان کاربرد لیزرهای تک مد را در سنجش از راه دور و طیف سنجی لیزری نام برد. تک مد بودن لیزر در این حالت، باعث سهولت تفسیر داده های تجربی نیز می شود. لیزرهای تک مد طولی همچنین از پایداری فرکانسی بیشتری نسبت به لیزرهای چند مدی برخوردار هستند.

با توجه به کاربردهای مختلف این لیزرها، در این پروژه سعی شده است تا از یک لیزر گازکربنیک ضربانی برانگیخته عرضی فشار جوی (TEA[1])، خروجی تک مد طولی حاصل گردد. در فصل اول این پایان نامه، فیزیک لیزرهای CO_2 و خصوصاً لیزر TEA CO_2 به اختصار شرح داده شده است. روشهای مختلفی برای به دست آوردن تک مد طولی از لیزر وجود دارد که در فصل دوم انواع این روشها توضیح داده شده است.

در فصل سوم روش به کار رفته در این پروژه به طور کامل شرح داده شده است و ملاحظات عملی و نتایج تجربی ارائه شده است.

[1] Transverse Excited Atmospheric

۱

لیزر گاز کربنیک ضربانی برانگیخته عرضی فشار جوی

۱-۱ لیزرهای گازی مولکولی

لیزر گازکربنیک یکی از مهمترین لیزرهای گازی مولکولی محسوب می شود. در این لیزرها از گذار بین ترازهای انرژی مولکول استفاده می شود. وابسته به نوع گذارهای درگیر در عمل لیزری، لیزرهای گازی مولکولی به سه گروه تقسیم می شوند :

لیزرهای ارتعاشی- الکترونی؛ که در آن گذار، بین ترازهای ارتعاشی دو حالت مختلف الکترونی صورت می گیرد و طول موج نوسان در ناحیه مرئی— فرابنفش جای می گیرد.

لیزرهای ارتعاشی- چرخشی؛ در این گروه گذار، بین ترازهای ارتعاشی یک حالت الکترونی (معمولاً حالت پایه الکترونی) انجام می شود که با توجه به نوع گذار، لیزر در ناحیه مادون قرمز میانی و دور (۵-۳۰۰ میکرومتر) تابش می کند و

لیزرهای چرخشی؛ که در آنها گذار لیزری بین ترازهای مختلف چرخشی یک حالت ارتعاشی صورت می گیرد و در ناحیه طول موجی مادون قرمز دور (۲۵ میکرومتر تا ۱ میلیمتر) نوسان می کنند.

لیزر CO_2 در گروه لیزرهای گازی مولکولی ارتعاشی- چرخشی قرار می گیرد، چرا که گذار لیزری بین ترازهای ارتعاشی مختلف حالت پایه الکترونی صورت می گیرد. این لیزر در دو شاخه لیزری ۹/۶ و ۱۰/۶ میکرون در ناحیه طول موجی مادون قرمز میانی نوسان می کند.

۱-۲ساختار ارتعاشی- چرخشی مولکول دی اکسید کربن

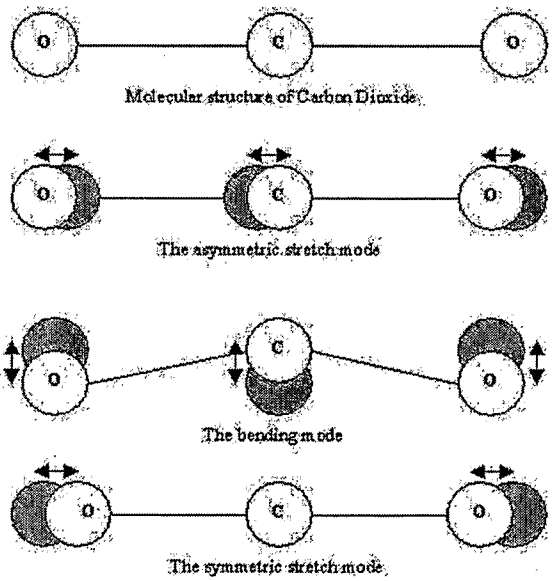
عمل لیزری در لیزرهای CO_2 بین ترازهای ارتعاشی- چرخشی کم انرژی مولکول CO_2 رخ می دهد. اطلاعاتی در مورد ساختار ارتعاشی- چرخشی مولکول، ترازهای انرژی شرکت کننده در عمل لیزری و احتمالهای گذار، برای درک فرایند لیزری ضروری است. برای به دست آوردن این مشخصات مولکولی به محاسبه معادلات موج نیازمندیم؛ البته حل دقیق معادلات موج توصیف کننده حرکت اتمها در داخل مولکول (نسبت به مرکز جرم) مسأله پیچیده ای است، ولی نتایج تجربی طیف سنجی مولکولی

مولکول CO_2 نشان داده است که رابطه ساده‌ای بین مقادیر انرژی برقرار است، به‌طوری‌که انرژی مولکول را می توان به صورت مجموع انرژی ارتعاشی و انرژی چرخشی آن در نظر گرفت.

نتایج طیف سنجی این امکان را می دهد که رفتار ارتعاشی و چرخشی مولکول به طور مجزا در نظر گرفته شود و نتایج هر دو محاسبه برای بررسی رفتار هر سه اتم در مولکول CO_2 ترکیب شود؛ پس می توان از هر اختلالی در حالات ارتعاشی ناشی از چرخش مولکول صرفنظر کرد و بنابراین معادلات موج، حاصلضرب معادلات موج ارتعاشی و چرخشی خواهند بود.

برای درک حرکات ارتعاشی و به دست آوردن انرژیهای آنها نمی توان از مدل نوسانگر هماهنگ ساده استفاده کرد و در هامیلتونی سیستم انحراف از حالت هماهنگ با یک میدان نیروی ناهماهنگ درنظر گرفته می شود؛ این ثابتهای میدان ناهماهنگ را می توان از طیفهای به دست آمده از نتایج طیف سنجی به‌دست آورد. سپس ترازهای انرژی و احتمالات گذار را با داشتن این ثابتها و حل مسأله با استفاده از تئوری اختلال مستقل از زمان، می توان به طور دقیق محاسبه کرد.

برای یک مولکول n اتمی موضع هر اتم را می توان با سه مختصه تعیین کرد؛ بنابراین چنانچه ذرات مستقل از هم فرض شوند، تعیین مختصات کل سیستم به $3n$ مختصه نیاز دارد. برای تعیین مختصات مرکز جرم سه مختصه لازم است، پس $3n-3$ درجه آزادی برای حرکتهای درونی سیستم باقی می ماند. چرخش یک مولکول غیرخطی را می توان به سه مؤلفه که متناظر با دوران حول هر یک از محورهای مختصات است تقسیم نمود، پس $3n-6$ مختصه به ارتعاشهای مولکولی اختصاص می‌یابد؛ اگر مولکول خطی باشد مؤلفه چرخش حول محور پیوندی را ندارد و بنابراین $3n-5$ درجه آزادی ارتعاشی دارد. در هر دو حالت چون یک مولکول n اتمی دارای $n-1$ پیوند است، $n-1$ درجه آزادی ارتعاشی به صورت ارتعاشهای کششی و بقیه ارتعاشات خمشی هستند.



شکل (۱-۱) مدهای ارتعاشی مولکول CO_2

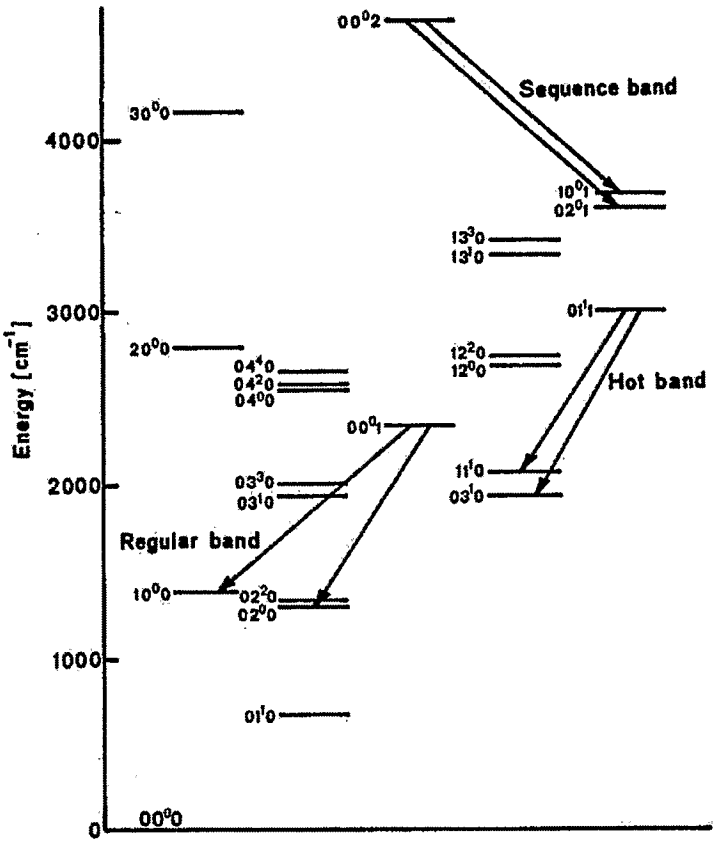
مولکول CO_2 یک مولکول سه اتمی خطی است که دارای یک محور تقارن و یک صفحه تقارن عمود بر این محور می باشد، بنابراین مولکول CO_2 فقط دو درجه آزادی چرخشی دارد؛ و ۵-۳×۳ یا ۴ درجه آزادی ارتعاشی خواهد داشت؛ این مدها به ترتیب مد ارتعاشی کششی متقارن، مدخمشی و مد کششی نامتقارن نامیده می شوند. نمایش ساده حرکات ارتعاشی در این مدها در شکل (۱-۱) نشان داده شده است. مد خمشی دارای تبهگنی دوگانه است، این دو تراز تبهگن در غیاب هر عامل خارجی که جهت خاصی را در فضا برمی‌گزینند، هم انرژی هستند؛ بنابراین سه مد ناتبهگن وجود داردکه به ترتیب با ν_1 و ν_2 و ν_3 نشان داده می‌شوند. رفتار نوسانی مولکول با سه عدد کوانتومی n_1 و n_2 و n_3 که تعداد کوانتای انرژی در هریک از مدهای معرفی شده را بیان می‌کند، توصیف می‌شود. بنابراین ترازهای ارتعاشی با این سه عدد کوانتومی و به شکل (n_1, n_2, n_3) بیان می شوند. شکل (۱-۲) برخی از ترازهای ارتعاشی کم انرژی مولکول CO_2 را نشان می دهد.

با در نظر گرفتن مدل نوسانگر هماهنگ برای هامیلتونی ارتعاش مولکول و جمع کردن آن با هامیلتونی چرخشی که آن را نیز به صورت هامیلتونی چرخش یک جسم صلب کروی کلاسیک در نظر می گیریم، انرژیهای ارتعاشی و چرخشی مولکول به صورت :

$$E_\nu = hc[\omega_1(n_1+\frac{1}{2})+\omega_2(n_2+1)+\omega_3(n_3+\frac{1}{2})] \qquad (۱-۱)$$

$$E_r = Bhcj(j+1) \qquad (۱-۲)$$

به دست می آید، که $\omega_3 = 2396.4cm^{-1}, \omega_2 = 672.2cm^{-1}, \omega_1 = 1351.2cm^{-1}$ اعداد موج نوسانگر هماهنگ هستند. عدد یک در ویژه حالت انرژی مد ارتعاشی ν_2، به دلیل وجود تبهگنی مرتبه دوم در این مد ظاهر شده است؛ البته این تبهگنی تا زمانی وجود دارد که ارتعاش مولکول دقیقاً هماهنگ درنظر گرفته شود. با وارد کردن نیروهای ناهماهنگ در هامیلتونی یک شکاف جزئی بین این دو انرژی تبهگن ایجاد می گردد؛ این نیروهای ناهماهنگ به صورت اختلال مستقل از زمان در هامیلتونی ظاهر می گردند و در آن صورت ویژه انرژی که در اینجا به دست آمده است، پاسخ مرتبه صفراختلال داده شده ، E_ν^0 ، است.



شکل (۱-۲) بعضی از ترازهای ارتعاشی مولکول CO_2

در ویژه مقدار انرژی چرخشی به دست آمده B ثابت دورانی و j عدد کوانتمی دورانی نامیده می شود. این ویژه مقدار که مقادیر گسسته انرژی را نشان می دهد، دارای تبهگنی $g(j)=2j+1$ مرتبه است. همان طور که می دانیم انرژیهای دورانی حدود یک مرتبه ابعادی کوچکتر از انرژیهای ارتعاشی هستند و می توان آنها را به صورت ساختار ریزی برای ترازهای ارتعاشی درنظرگرفت.

اگر ارتعاش پیوندهای مولکولی دامنه بزرگی داشته باشد، انحراف از حالت هماهنگ به قدری زیاد می شودکه سبب انحراف بارزی از نتایج تقریبی به دست آمده می گردد. همان طور که گفته شد با حل مسأله عدم هماهنگ بودن نوسانها ، تصحیح ناشی از ناهماهنگ بودن نوسان با اختلال مستقل از زمان اعمال می شود؛ با این تصحیح ترازهای ارتعاشی دیگر دارای فواصل یکسان از یکدیگر نیستند و فاصله ترازها با افزایش تعداد مد ارتعاشی به کندی کاهش می یابدکه با مشاهده های تجربی نیز توافق دارد.

اثر مهم دیگری که در محاسبات دقیقتر باید درنظر گرفته شود، اثر ناشی از جفت شدگی بین حالتهای ارتعاشی مختلف، به صورتهای گوناگون از قبیل $\nu_1+\nu_2$ ، $\nu_1+\nu_3$ ، $\nu_1+\nu_2+\nu_3$ ، $\nu_2+2\nu_3$ ، $\nu_1+3\nu_3$ و مانند اینهاست؛ وجود چنین حالتهایی در طیف رامان مادون قرمز گازهای

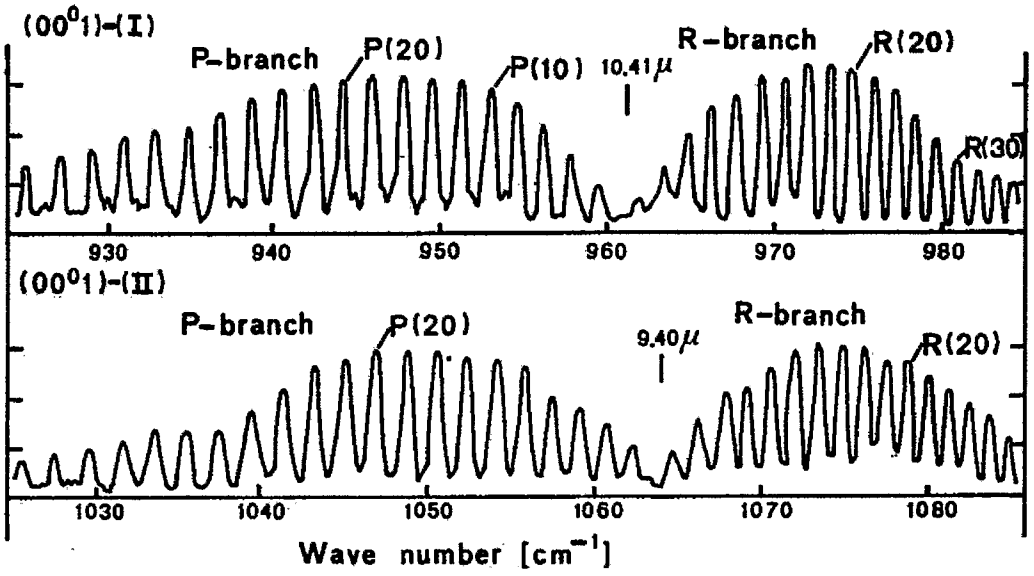
مولکولی مشاهده شده است. تعدادی از حالتهای ترکیبی که با دو عدد کوانتومی ارتعاشی غیر صفر مشخص شده اند، مثل 110 ،021 ،120 ،130 وغیره در نمودار ارتعاشی مولکول CO_2 دیده می شود.

شدت خطوط طیفی فرعی و ترکیبی فرعی- اصلی مشاهده شده کمتر از شدت خطوط اصلی و ترکیبی اصلی است؛ البته در موارد خاصی دیده می شود که خطوط طیفی فرعی شدت قابل ملاحظه ای دارند. این حالت مربوط به نوعی تشدید، بین حالت ضعیفتر با یک حالت اصلی با انرژی نزدیک به آن است. با روشهای مکانیک کوانتومی نشان داده شده است که هرگاه اختلاف انرژیهای دو حالت اصلی یا اصلی با فرعی، کمتر از متوسط انرژی جنبشی مولکولها در محیط($\frac{3}{2}kT$) باشد، نوعی انتقال انرژی تشدیدی بین دو تراز صورت می گیردکه سبب ایجاد دو حالت جدید در بالا و پایین میانگین انرژی دو تراز قبلی می گردد و با افزایش شدت حالت ضعیفتر همراه است؛ این اثر تشدید فرمی نام دارد.

برای مثال در طیف مولکول CO_2 دو خط قوی با انرژی های $1388.1\ cm^{-1}$ و 1285.8 مشاهده می گردد. چون دو تراز ν_1 و $2\nu_2$ انرژی های بسیار نزدیک به یکدیگر دارند، بین آنها تشدید فرمی رخ می دهد. در واقع این دو خط مشاهده شده، معادل ترکیب خطوط (10^00) و (02^00) هستند.

مسأله دیگری نیز وجود داردکه به جفت شدگی بین حرکتهای ارتعاشی و دورانی مولکول مربوط است که تا به حال از آن صرفنظر شد. از دیدگاه کلاسیک، دوران پیوند سبب ایجاد نیروی گریز از مرکز (از دید ناظر واقع در مرکز جرم سیستم) می شود باعث عدم تقارن در نیروی وارد بر اتمهای نوسان کننده می گردد و در واقع سبب ناهماهنگ شدن نوسانگر می شود؛ از این رو ترازهای ارتعاشی و چرخشی در ساختار طیفی مولکول با یکدیگر ترکیب می شوند.

طبق قواعد انتخاب گذار بین ترازهای مولکولی، برای Δj فقط مقادیر صفر و ۱ ± مجاز است. مقادیر مختلف Δj سه نوع خط طیفی ارتعاشی- چرخشی را مشخص می کنندکه شاخه های Q،R،P نامیده می شوند و با مقدارهای ۱- ، ۱+ و صفر هم ارز هستند. با در نظر گرفتن تقریب دوقطبی الکتریکی برای این گذارها فقط شاخه های R وP مجاز هستند؛ در خطوط لیزری مشاهده شده از مولکول CO_2 نیز شاخه های P وR شدید هستند اما شاخه Q شدت بسیار جزئی دارد. شکل زیر خطوط جذبی مولکول CO_2 را در نوارهای ارتعاشی ۹/۶ و ۱۰/۶ میکرومتر نشان می دهد[1].



شکل (۱-۳) طیف جذبی مولکول CO_2 در نوارهای ارتعاشی ۹/۶ و۱۰/۶ میکرومتر[1]

چگالی جمعیت مولکول در ترازهای ارتعاشی حالت پایه الکترونی را می توان با استفاده از تابع توزیع ماکسول – بولتزمن محاسبه کرد. تابع توزیع چگالی جمعیت در ترازهای انرژی چرخشی نیز از جایگذاری شرطهای کوانتش یک چرخنده همگن و در نظر گرفتن مسائل ناشی از تبهگنی تراز و جفت شدگی ارتعاشی- دورانی در آمار ماکسول – بولتزمن به شکل :

$$n_{vj} \approx N_v \left(\frac{2hcB}{kT}\right)(2j+1)\exp\left[-F(j)\frac{hc}{kT}\right] \qquad (۳-۱)$$

$$F(j) = B_v j(j+1) - D_v j^2 (j+1)^2 \qquad (۴-۱)$$

به دست می آیدکه n_{vj} تعداد مولکولها با عدد چرخشی j در واحد حجم است و Nv تعداد کل مولکولهای تراز ارتعاشی ν در واحد حجم است. تراز مربوط به بیشینه مقدار n_{vj} از شرط $\frac{dn_{vj}}{dj} = 0$ به دست می آید و عبارت است از :

$$j_{\max} \approx \sqrt{kT/2hcB} - \frac{1}{2} \qquad (۵-۱)$$

برای $T = 400k$ به دست می آوریم : $j_{\max} \approx 19$