

*Санкт-Петербургский Государственный университет
Кафедра молекулярной спектроскопии*

Анализ вращательной зависимости проявлений эффекта Дике

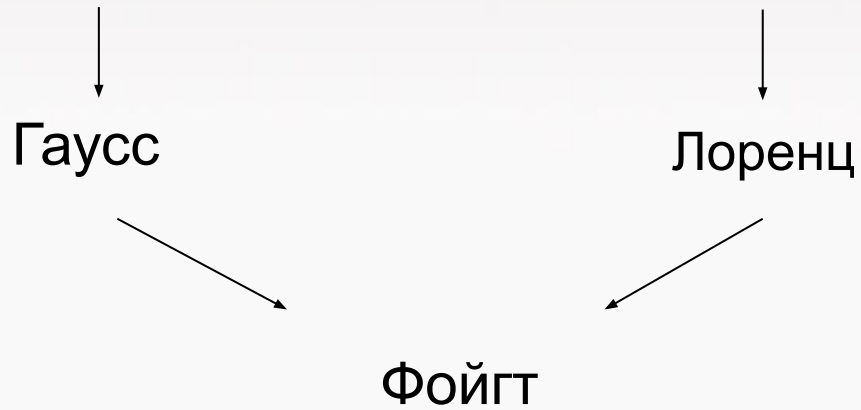
Бакалаврская работа студента
Пахомова Арсения Сергеевича

Научный руководитель:
д.ф.-м.н., профессор Филиппов Н.Н.

2017

Механизмы формирования контура

Эффект Доплера Ударное уширение



Влияние столкновений на контур



- уменьшение доплеровского уширения из-за ограничения свободного движения поглощающих молекул

Задачи работы

- Разработать неэмпирическую модель влияния столкновений на доплеровский контур
- Проанализировать эффект Дике в зависимости от масс частиц окружения и скорости вращательного движения активной молекулы

Расчет функции распределения

$$\Gamma(v_{1x}, v'_{1x}) = N v_{av}(v_{1x}) \sigma(v_{1x}, v'_{1x}; b, j)$$

N – концентрация

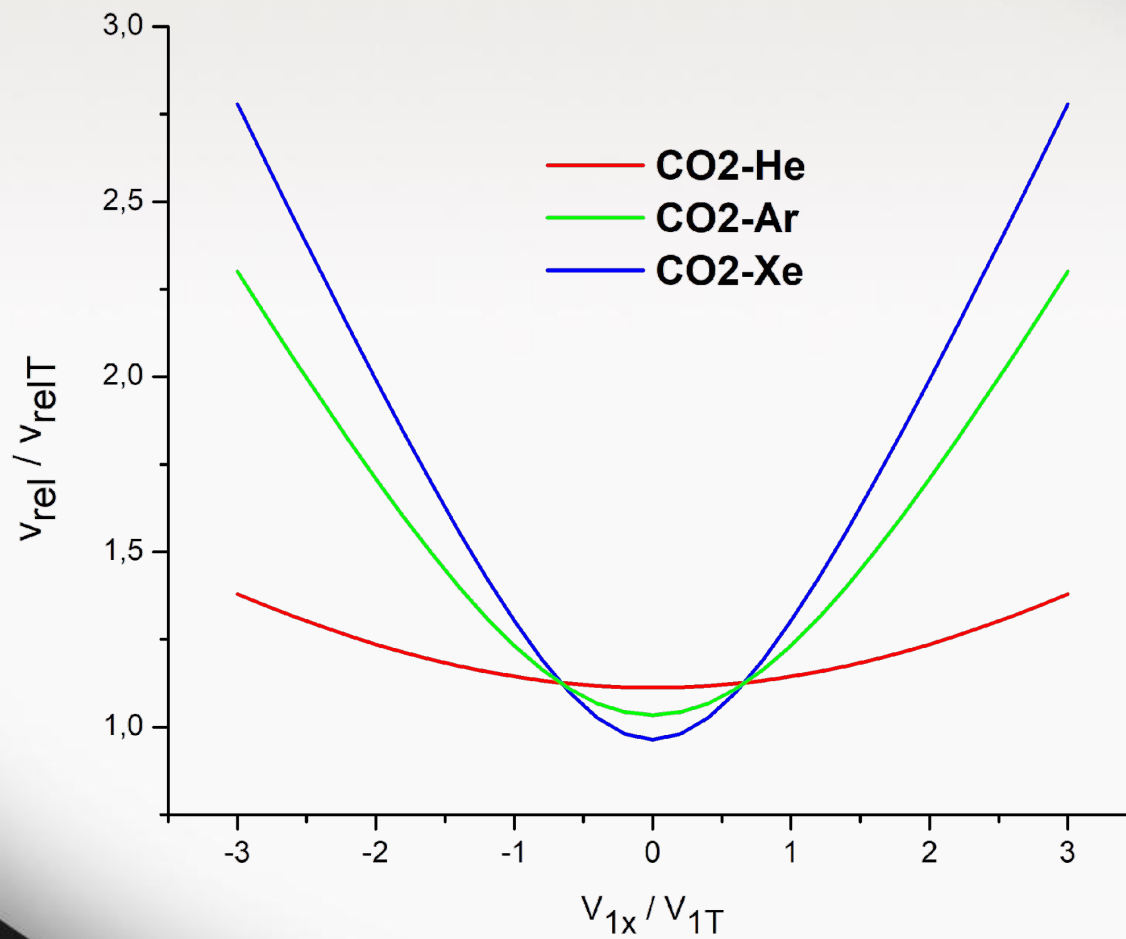
σ – сечение столкновения

b – прицельный параметр

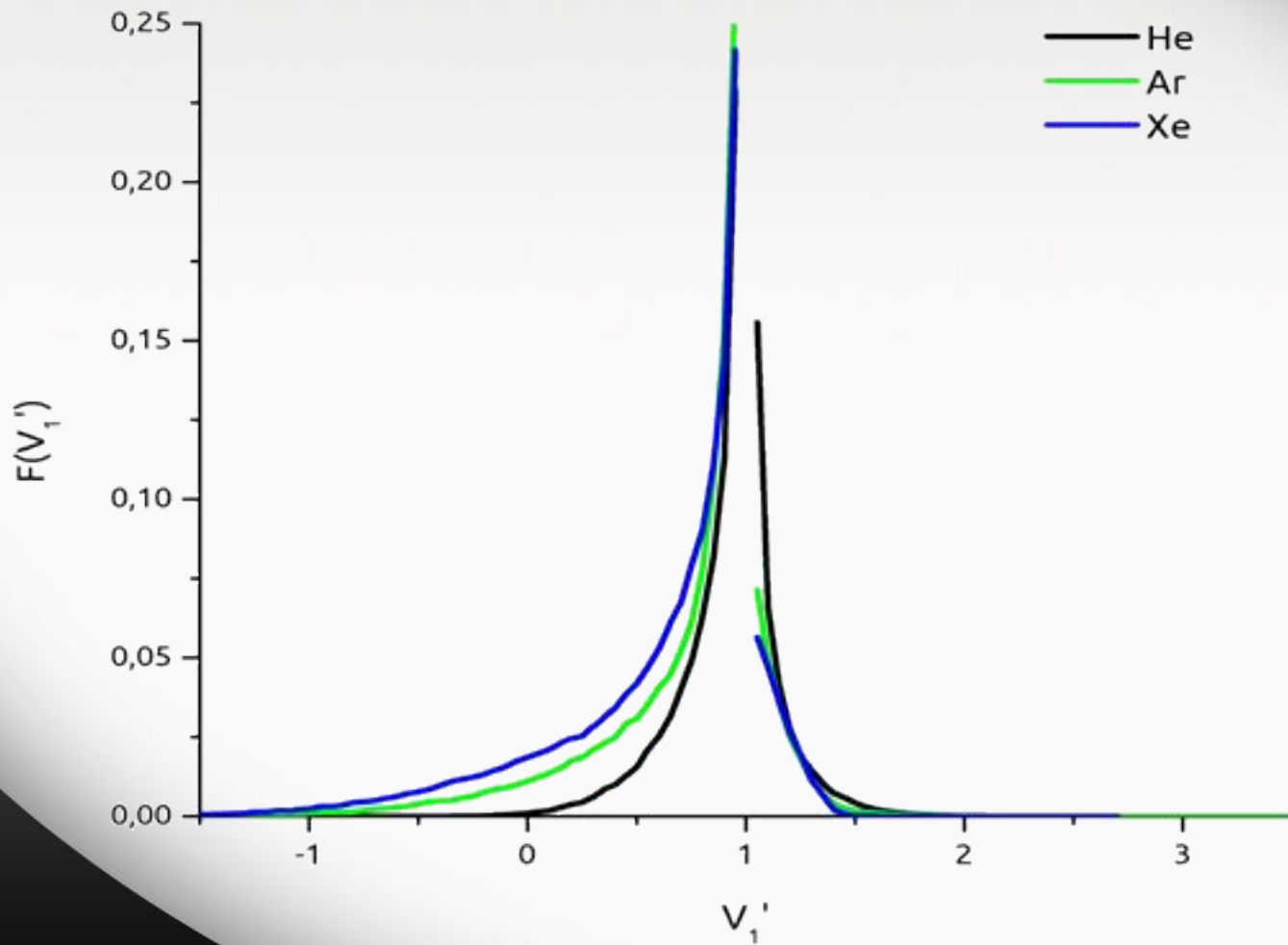
j – угловой момент молекулы

$$v_{av}(v_{1x}) = \frac{2}{v_T^2 v_{2T} \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dv_{2x} e^{-v_{2x}^2/v_{2T}^2} \int_0^{\infty} dv_{yz} v_{yz} e^{-v_{yz}^2/v_T^2} [(v_{1x} - v_{2x})^2 + v_{yz}^2]^{\frac{1}{2}}$$

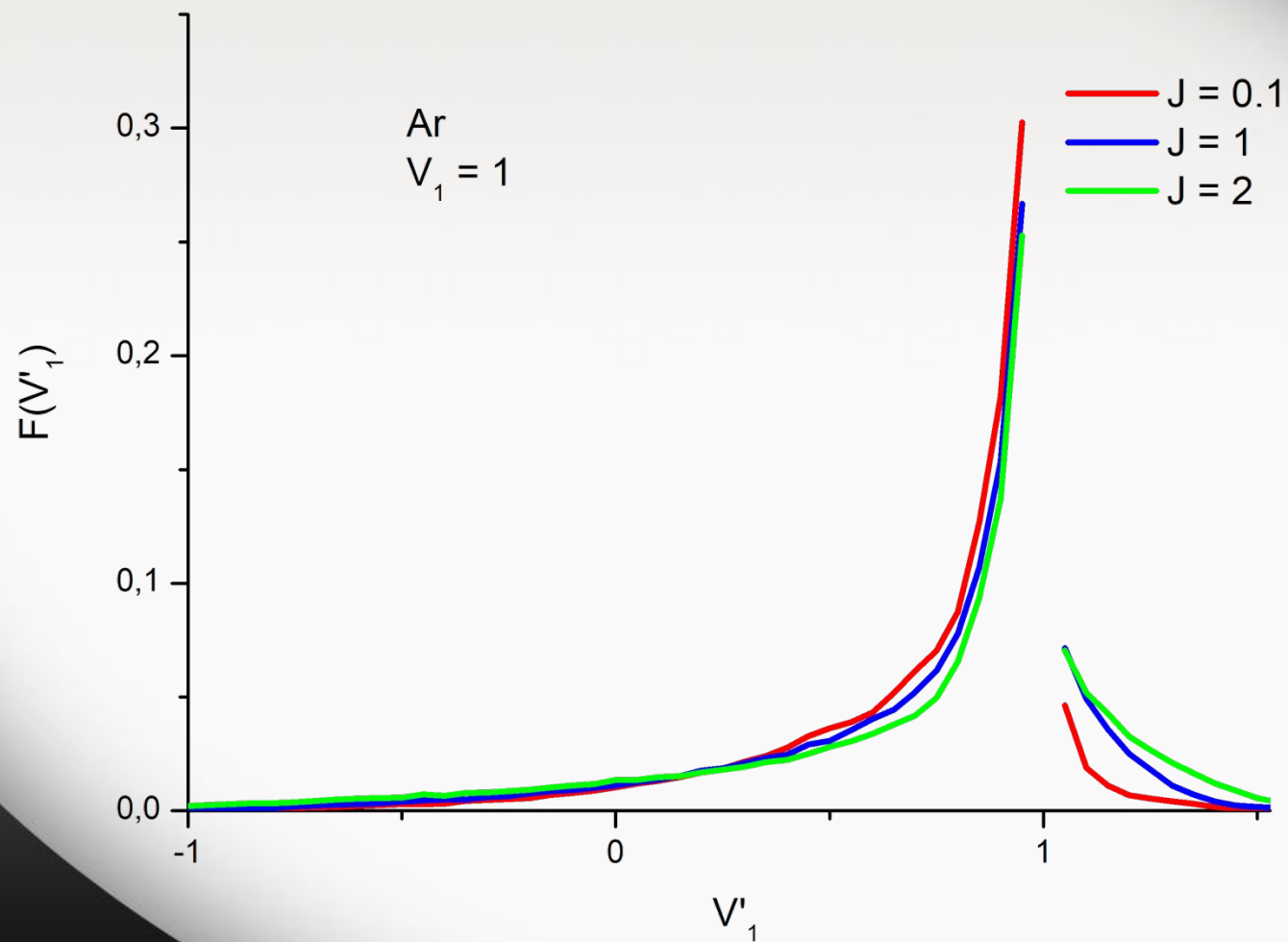
Анализ зависимости частоты столкновений от проекции скорости молекулы



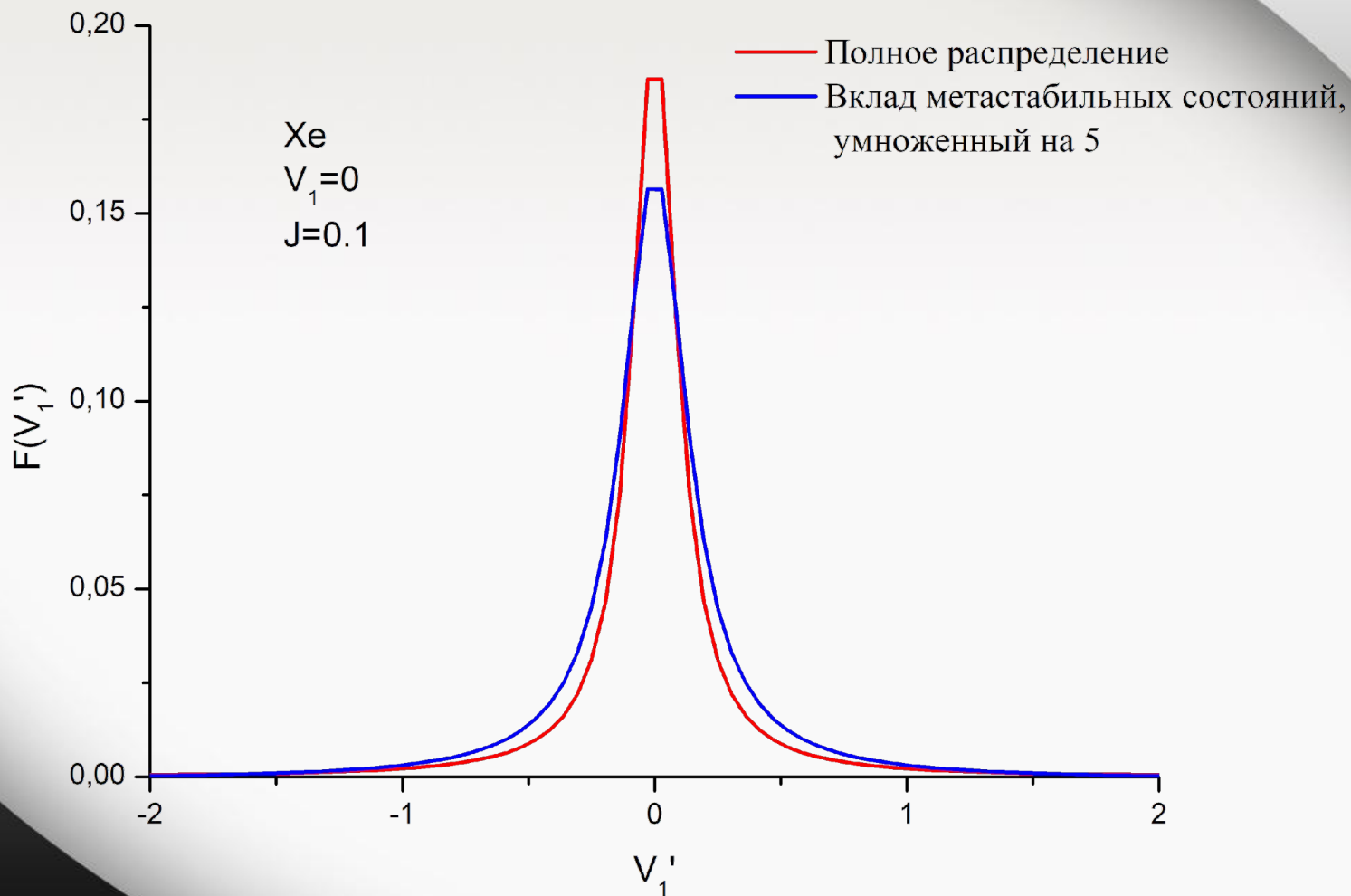
Анализ вероятностей изменения проекции скорости



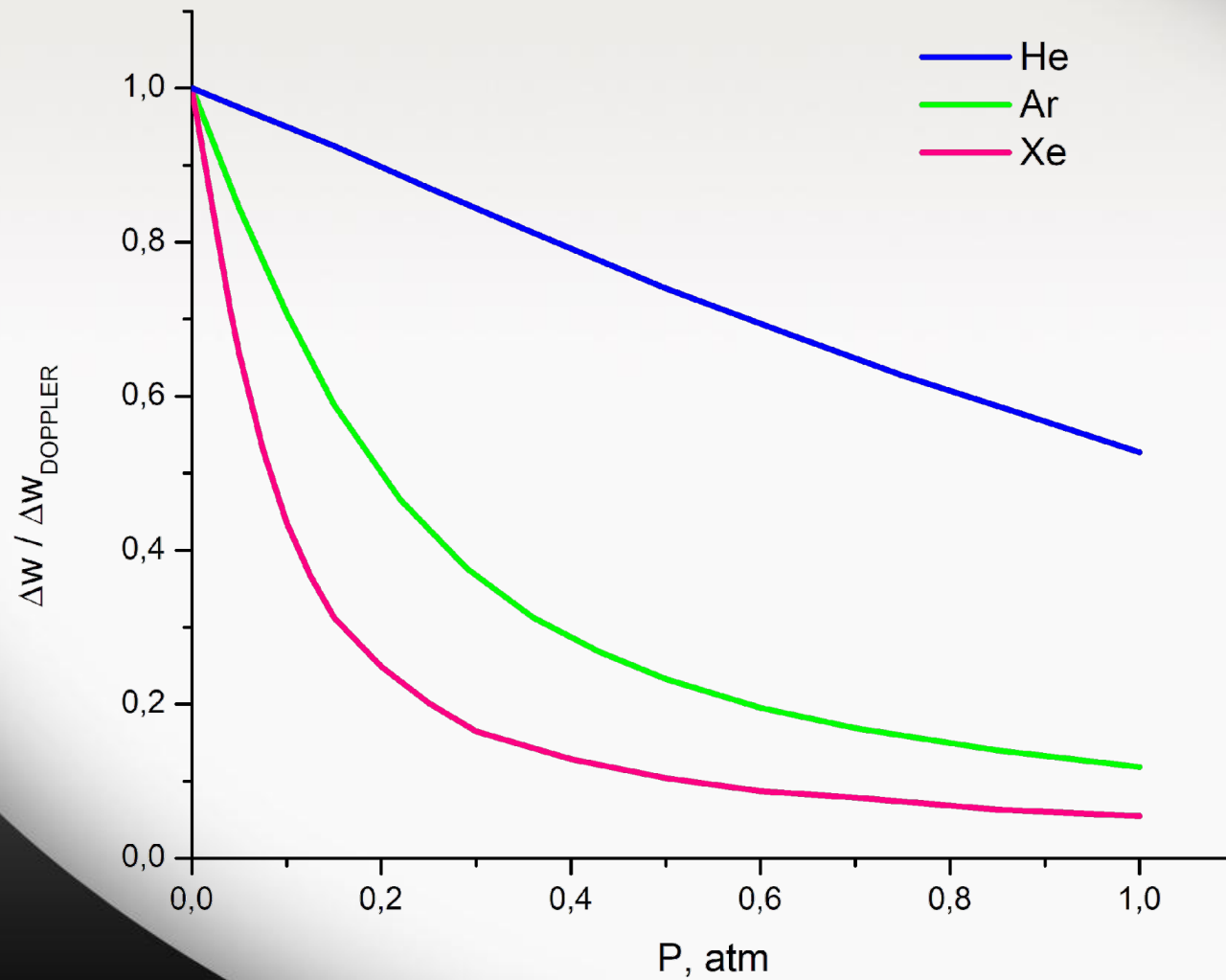
Анализ вероятностей изменения проекции скорости



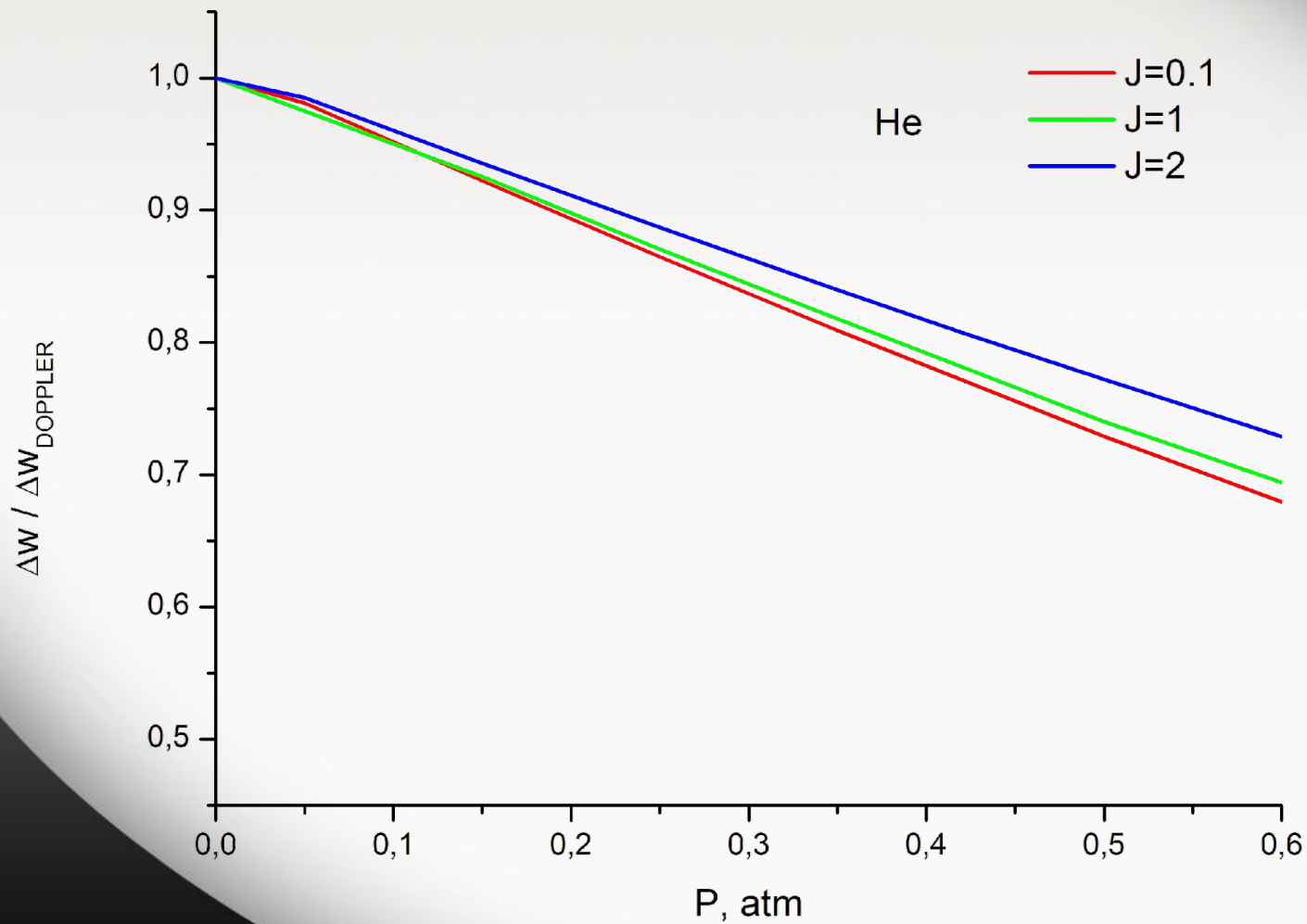
Метастабильные состояния



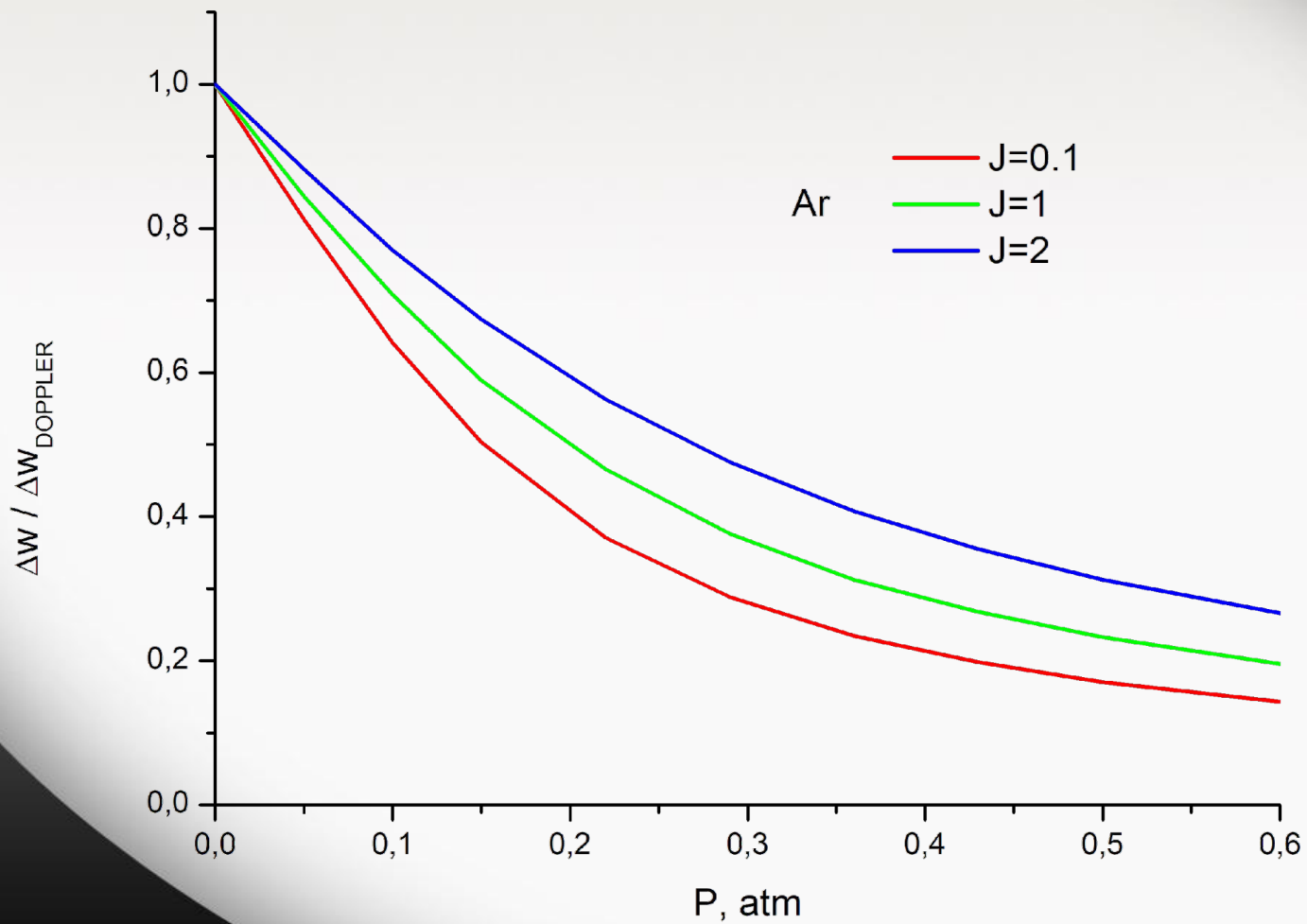
Зависимость ширины контура от давления для разных частиц



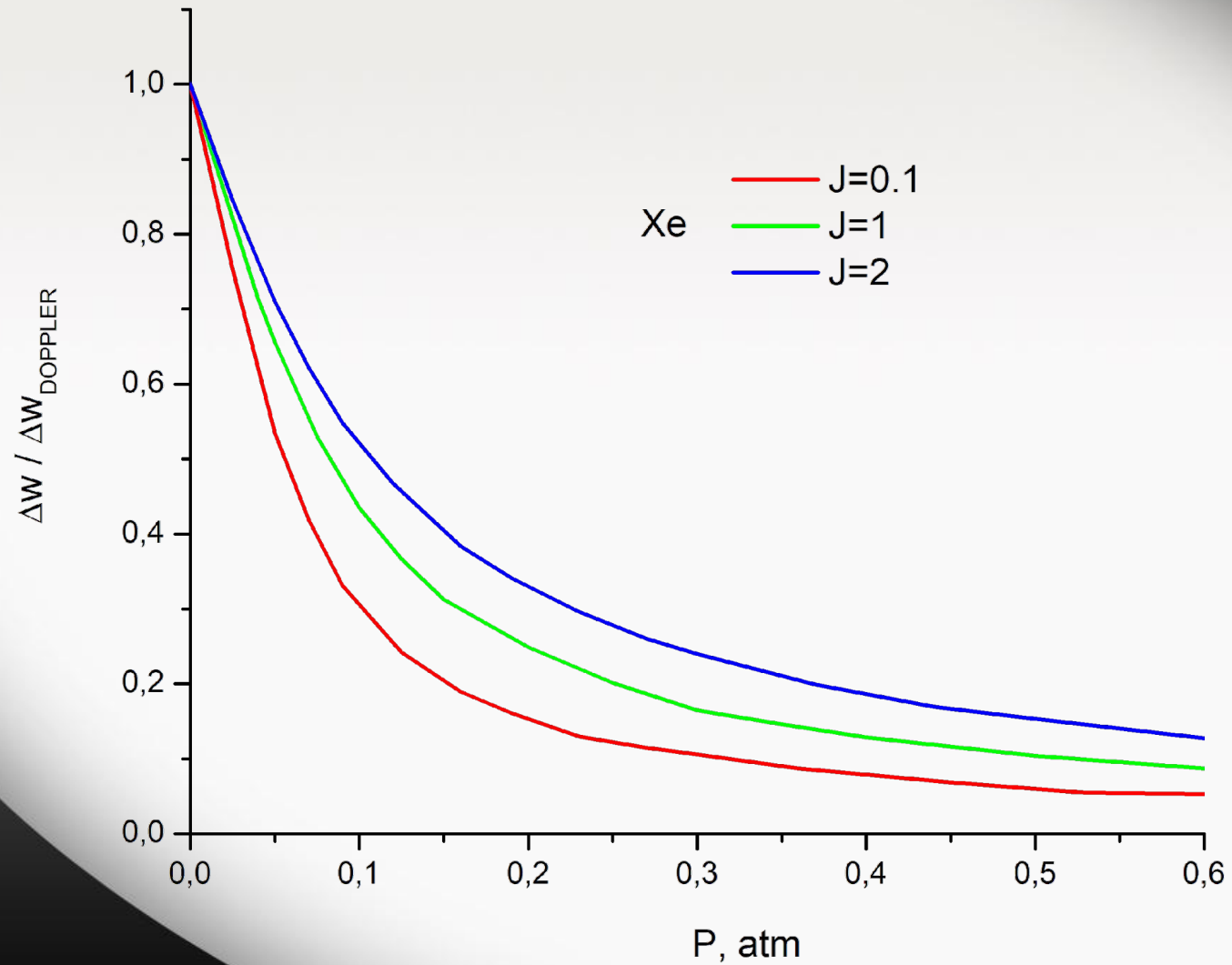
Зависимость ширины контура от давления для разных начальных значений углового момента



Зависимость ширины контура от давления для разных начальных значений углового момента



Зависимость ширины контура от давления для разных начальных значений углового момента



Выводы и дальнейшая работа