

碘分子在 He-Ne 激光器输出 谱线范围内的振转带

赵克功 李 桦
(中国计量科学院) (西北大学物理系)

提 要

本文计算了在 He-Ne 激光器可见光九条谱线范围内所有可能出现的 $^{127}\text{I}_2$, $^{129}\text{I}_2$ 和 $^{127}^{129}\text{I}$ 分子振转带, 为进一步研究它们的超精细分裂和利用它们对 He-Ne 激光器进行稳频提供了参考。

一、引 言

“米是光在真空中, 在 $1/299792458$ 秒时间间隔内运行距离的长度。”这是 1983 年 10 月 20 日在法国巴黎举行的第十七届国际计量大会通过的新米定义^[1]。新的米的定义将对自然科学与技术科学产生深远的影响。贯彻这一新米定义是利用稳频激光器的真空波长值和频率值。因此研究稳频激光器是当前物理学家和计量学家的重要研究课题之一。

在可见光范围内, 适用于稳频的激光器, 目前有氦氖激光器、氩离子激光器、连续染料激光器等。从应用角度讲, 氦氖激光器较为理想。为了充分利用氦氖激光器输出的诸谱线, 我们对 $^{127}\text{I}_2$ 、 $^{129}\text{I}_2$ 和 $^{127}^{129}\text{I}$ 分子在氦氖激光器九条可见光谱线范围内的振转带进行了计算, 为寻找对氦氖激光器进行稳频用的参考谱线和对碘分子超精细分裂进行研究提供参考。

二、碘分子在 He-Ne 激光器可见光谱范围内的振转带的计算

Ne 原子 $3s_2$ 能级到 $2p$ 的十个精细结构子能级之间, 除去 $3s_2-2p_3$ 是禁戒跃迁外, 其余都有一定的跃迁几率(表 1)。在 He-Ne 激光器中腔内加色散元件, 可以得到不同的波长输出, 利用程序控制偏频可调谐氦氖激光光谱仪^[2], 已对 ^{127}I , ^{129}I 分子一些电子态跃迁振转带的超精细分裂^[3~5]进行研究。这些谱线多已作为稳频氦氖激光器的参考谱线。

这里计算了所有可能出现在多谱线 He-Ne 激光器增益线宽附近的 $^{127}\text{I}_2$, $^{129}\text{I}_2$ 和 $^{127}^{129}\text{I}$ 分子振转带。以表 1 给出的各波长值为中心, 取约 10 GHz 范围的碘分子振转带列入表 2。计算原理在文献[6]中已有详述。带[*]号者是已被研究过超精细结构的振转带。计算对基电子态转动量子数 J'' 取到 200。但由于按照 P. Luc 提供的振转常数计算时对 $J'' > 150$ 计算误差可能要大于 10^{-7} ^[5], 因此 $J'' > 150$ 的值列出仅供参考。

吸收信号强弱与碘分子在基态上粒子布居数成正比。未受激发的碘分子在基电子态振

表 1 Ne 原子 $3s_2-2p_i$ 跃迁波长(真空值)及其相应的自发辐射系数^[1]
 Table 1 Transition wavelengths of Ne atom $3s_2-2p_i$ (in vacuum) and the associated coefficients of spontaneous radiation

	跃迁波长 (nm)	$1/\lambda(\text{cm}^{-1})$	自发辐射系数(10^6 sec^{-1})
$3s_2-2p_1$	730.6851	13685.786	0.255
$3s_2-2p_2$	640.2839	15618.072	1.39
$3s_2-2p_3$	635.3606	15739.094	0.345
$2s_2-2p_4$	632.9909	15798.015	3.39
$3s_2-2p_5$	629.5408	15884.412	0.639
$3s_2-2p_6$	611.9703	16340.662	0.609
$3s_2-2p_7$	604.7802	16534.933	0.226
$3s_2-2p_8$	594.0958	16832.302	0.200
$3s_2-2p_9$	588.2531	16999.485	—
$3s_2-2p_{10}$	543.5155	18398.739	0.288

表 2 $^{127}\text{I}_2$ 、 $^{129}\text{I}_2$ 和 $^{127}\text{I}_1$ 、 $^{129}\text{I}_2$ 在 He-Ne 激光器发射谱线范围内的振转带和波长(真空)
 Table 2 Ro-vibrational bands and wavelengths (in vacuum) of $^{127}\text{I}_2$ 、 $^{129}\text{I}_2$ and $^{127}\text{I}^{129}\text{I}$ at the emission lines of He-Ne laser

He-Ne 激光谱线	$^{127}\text{I}_2$		$^{129}\text{I}_2$		$^{127}\text{I}^{129}\text{I}$	
	$\nu'-\nu''(J'')$	$\lambda(\text{nm})$	$\nu'-\nu''(J'')$	$\lambda(\text{nm})$	$\nu'-\nu''(J'')$	$\lambda(\text{nm})$
543.5155	39-4 R(4)	543.5200	57-7 R(6)	543.5197		
	50-2 P(195)	543.5197	55-5 R(127)	543.5195		
	32-2 P(24)	543.5197	47-5 R(84)	543.5193		
	32-2 R(27)	543.5196	57-6 P(93)	543.5192		
	41-2 R(169)	543.5186	33-0 R(178)	543.5192		
	37-2 R(138)	543.5185	52-4 R(151)	543.5191		
	29-1 P(30)	543.5184	60-5 R(135)	543.5190		
	29-0 R(127)	543.5183	62-4 P(159)	543.5186		
	39-4 P(1)	543.5183	58-5 P(132)	543.5183		
	60-7 P(44)	543.5179	62-6 P(105)	543.5182		
	39-4 R(3)	543.5173	29-1 P(3)	543.5182		
	55-4 R(155)	543.5170	38-1 P(181)	543.5171		
	35-2 P(110)	543.5163	29-1 R(6)	543.5169		
	26-0 R(12)	543.5162	59-7 P(39)	543.5163		
	44-5 R(36)	543.5160	42-4 R(89)	543.5153	50-6 P(37)	543.5186
	28-0 R(106)	543.5157	59-3 P(180)	543.5151	58-7 R(28)	543.5186
	44-5 P(34)	543.5156	49-2 P(195)	543.5148	59-3 P(179)	543.5185
	39-4 R(2)	543.5155	56-6 P(89)	543.5147	44-5 P(32)	543.5184
	39-1 P(187)	543.5155	29-1 P(2)	543.5144	44-5 R(34)	543.5181
	49-5 P(99)	543.5148	57-6 R(94)	543.5142	58-5 R(132)	543.5179
	39-4 R(1)	543.5147	59-7 R(40)	543.5141	38-2 P(145)	543.5165
	62-6 P(103)	543.5145	59-6 R(100)	543.5138	36-3 P(49)	543.5161
	30-1 P(75)	543.5136	57-7 P(4)	543.5136	44-2 R(183)	543.5161
	36-3 P(52)	543.5127	47-2 P(191)	543.5135	46-5 P(71)	543.5160
	26-0 P(8)	543.5126	29-1 R(5)	543.5134	32-2 P(13)	543.5155
	53-6 P(71)	543.5116	30-1 P(69)	543.5127	32-2 R(16)	543.5152
	27-0 R(77)	543.5116	57-7 R(5)	543.5125	46-3 P(160)	543.5149
	36-2 P(124)	543.5112	34-1 R(148)	543.5119	61-7 R(52)	543.5146
	29-1 R(33)	543.5111	41-1 P(197)	543.5118	30-1 P(72)	543.5146
			29-1 P(1)	543.5114	37-2 P(135)	543.5137
					27-0 P(70)	543.5136
					40-3 P(122)	543.5119
					43-2 R(179)	543.5118

(续表)

He-Ne 激光谱线	$^{127}\text{I}_2$		$^{129}\text{I}_2$		$^{127}\text{I}^{129}\text{I}$		
	$\nu'-\nu''(J'')$	$\lambda(\text{nm})$	$\nu'-\nu''(J'')$	$\lambda(\text{nm})$	$\nu'-\nu''(J'')$	$\lambda(\text{nm})$	
594.0958	16-3 R(68)	594.1002	20-5 P(7)	594.1002	21-4 R(161)	594.0973	
	19-3 R(171)	594.0993	18-3 R(146)	594.0991	30-8 P(117)	594.0972	
	11-0 R(131)	594.0988	23-6 P(67)	594.0988	30-8 R(192)	594.0969	
	21-5 P(88)	594.0987	17-3 R(114)	594.0981	28-7 P(136)	594.0964	
	23-4 P(193)	594.0975	32-7 P(190)	594.0980	13-0 R(190)	594.0963	
	18-2 R(199)	594.0964	20-5 R(11)	594.0968	20-5 P(15)	594.0936	
	29-8 R(97)	594.0951	12-1 P(71)	594.0968	29-7 P(153)	594.0927	
	25-7 R(43)	594.0949	14-2 P(67)	594.0946	18-4 R(51)	594.0925	
	17-2 R(179)	594.0995	12-0 P(158)	594.0944	25-7 R(41)	594.0911	
	29-7 R(156)	594.0939	23-6 R(71)	594.0939	28-8 R(62)	594.0911	
	20-5 P(21)	594.0929	14-2 R(72)	594.0938	26-7 R(90)	594.0902	
	25-7 P(39)	593.0909	20-5 P(6)	594.0929			
	18-3 R(147)	594.0903	35-8 R(185)	594.0923			
	16-3 P(63)	594.0901	12-0 R(163)	594.0922			
			10-0 P(71)	594.0922			
			28-7 P(136)	594.0906			
	611.9703	7-1 P(24)	611.9758	15-5 P(40)	611.9753	9-2 P(39)	611.9718
		20-6 R(161)	611.9736	23-7 P(168)	611.9753	7-0 P(148)	611.9713
		15-5 P(43)	611.9727	11-3 R(50)	611.9742	12-3 R(116)	611.9693
		11-3 P(48)	611.9713	24-7 R(189)	611.9740	9-1 P(150)	611.9690
15-5 R(48)		611.9707	13-3 P(148)	611.9736	7-1 R(25)	611.9690	
9-2 R(47)		611.9704*	7-1 R(20)	611.9732	17-6 R(32)	611.9687	
17-6 R(34)		611.9698	6-0 R(107)	611.9730	13-4 R(52)	611.9681	
24-7 R(188)		611.9697	15-5 R(45)	611.9730	7-1 P(19)	611.9678	
17-6 P(29)		611.9660	22-8 R(72)	611.9729	11-2 P(150)	611.9664	
22-8 P(68)		611.9657	16-5 P(103)	611.9726	17-6 P(27)	611.9654	
			7-1 P(14)	611.9723			
			21-7 R(125)	611.9716			
			14-4 R(113)	611.9711*			
			10-2 P(110)	611.9705*			
			6-0 P(101)	611.9682			
			17-6 R(30)	611.9681			
			8-1 P(107)	611.9671			
			17-6 P(25)	611.9652			
604.7802		17-5 R(49)	604.7860	19-6 R(15)	604.7857	19-6 R(20)	604.7860
		22-7 R(78)	604.7846	7-0 R(49)	604.7857	17-5 R(47)	604.7859
	19-6 R(24)	604.7845	10-0 R(190)	604.7854	8-0 R(121)	604.7846	
	9-1 R(64)	604.7839	17-5 R(45)	604.7849	12-1 P(183)	604.7844	
	18-5 P(101)	604.7815	29-8 R(178)	604.7831	24-8 P(49)	604.7843	
	17-4 R(147)	604.7813	19-6 P(10)	604.7817	12-1 R(188)	604.7838	
	11-2 P(62)	604.7810	30-8 P(187)	604.7812	7-0 P(46)	604.7837	
	9-0 R(161)	604.7808	7-0 P(43)	604.7808	12-2 R(122)	604.7831	
	23-6 R(173)	604.7786	9-0 R(160)	604.7800	24-8 R(58)	604.7819	
	17-5 P(44)	604.7782	15-4 P(52)	604.7797	21-6 R(128)	604.7812	
	19-6 P(19)	604.7773	15-4 R(37)	604.7793	10-0 P(185)	604.7812	
	13-3 P(61)	604.7772	17-5 P(40)	604.7785	18-5 R(105)	604.7805	
	27-7 R(191)	604.7769	8-0 R(120)	604.7772	28-8 P(160)	604.7803	
	11-1 P(155)	604.7768	12-2 P(116)	604.7771	19-6 P(15)	604.7803	
			27-7 R(192)	604.7764	17-5 P(42)	604.7789	
			19-6 R(14)	604.7756	9-1 P(56)	604.7787	
					11-2 P(60)	604.7786	
					20-6 P(89)	604.7776	
					26-7 P(174)	604.7755	

(续表)

He-Ne 激光谱线	$^{127}\text{I}_2$		$^{129}\text{I}_2$		$^{127}\text{I } ^{129}\text{I}$	
	$\nu'-\nu''(J'')$	$\lambda(\text{nm})$	$\nu'-\nu''(J'')$	$\lambda(\text{nm})$	$\nu'-\nu''(J'')$	$\lambda(\text{nm})$
632.9909	6-3 P(33)	632.9923*	17-8 R(120)	632.9966	2-0 R(144)	632.9957
	1-0 R(80)	632.9918	15-7 R(125)	632.9961	19-8 R(176)	632.9940
	11-5 R(127)	632.9914*	8-4 R(60)	632.9919*	6-3 P(33)	632.9907*
	17-7 R(182)	632.9912	8-4 P(54)	632.9913*	10-4 R(164)	632.9891
	16-8 P(64)	632.9871	12-6 P(69)	632.9903*	1-0 R(80)	632.9878
	6-3 R(39)	632.9866	5-1 P(184)	632.9900	17-7 P(178)	632.9872
	3-1 R(99)	632.9860	5-1 R(190)	632.9896	10-5 P(64)	632.9863
	8-3 R(162)	632.9853	6-3 P(33)	632.9894*	14-7 R(74)	632.9862
			4-1 R(153)	632.9892	6-3 R(39)	632.9850
			5-2 R(112)	632.9878		
			7-2 R(193)	632.9873		
			10-5 R(70)	632.9853		
			18-8 R(152)	632.9853		
			8-3 P(157)	632.9852		
		16-7 P(153)	632.9851			
629.5480	9-4 R(79)	629.5544	13-6 P(80)	629.5537	10-3 R(198)	629.5532
	5-2 P(44)	629.5533	19-8 P(148)	629.5537	9-4 R(79)	629.5531
	13-5 R(167)	629.5508	4-1 R(116)	629.5535	16-7 R(128)	629.5505
	14-5 R(193)	629.5501	4-0 R(193)	629.5530	11-4 R(169)	629.5494
	6-1 P(190)	629.5468	11-4 P(164)	629.5529	11-5 R(84)	629.5486
	18-8 R(121)	629.5459	9-4 R(79)	629.5520	18-7 R(183)	629.5484
	15-7 P(77)	629.5454	10-3 P(193)	629.5497	16-6 R(189)	629.5450
	12-4 R(196)	629.5452	14-5 R(194)	629.5477	16-7 P(123)	629.5437
	5-2 R(50)	629.5439	10-4 P(128)	629.5474	13-6 R(85)	629.5434
	9-4 P(73)	629.5436	7-2 P(161)	629.5441	14-6 R(132)	629.5432
			5-2 P(43)	629.5434	9-4 P(73)	629.5427
			18-8 R(122)	629.5430		
	730.6851	—	—	—	—	—
	640.2839	14-8 R(54)	640.2889	3-2 P(73)	640.2893	8-5 P(13)
3-1 R(175)		640.2869	14-8 P(51)	640.2888	9-4 R(187)	640.2842
16-8 P(145)		640.2864	14-7 P(150)	640.2885	8-5 R(19)	640.2838
7-4 R(106)		640.2861	15-8 R(116)	640.2874	15-8 P(110)	640.2811
11-5 P(181)		640.2854	13-7 R(118)	640.2863	14-8 R(55)	640.2784
11-6 R(116)		640.2846	5-2 R(182)	640.2857		
8-5 P(10)		640.2833*	9-4 P(181)	640.2839		
8-5 R(16)		640.2825	5-3 P(90)	640.2828		
2-0 P(197)		640.2792	4-2 R(142)	640.2819		
8-4 P(147)		640.2780	8-5 P(15)	640.2809		
12-7 R(52)		640.2779	9-5 P(108)	640.2801		
			8-5 R(21)	640.2798		
			13-6 P(181)	640.2785		
			1-1 R(50)	640.2779		
635.3606	4-2 P(70)	635.3674	15-8 R(30)	635.3660	11-6 R(20)	635.3625
	14-7 R(107)	635.3667	2-1 P(44)	635.3652	8-4 R(101)	635.3600
	9-4 R(148)	635.3660	6-3 R(92)	635.3623	11-6 P(14)	635.3586
	15-8 R(29)	635.3649	1-0 P(110)	635.3617	13-7 P(25)	635.3584
	11-6 P(13)	635.3647	11-6 R(21)	635.3587	15-8 P(23)	635.3582
	13-7 P(24)	635.3623	10-5 P(101)	635.3574	8-4 P(95)	635.3555
	2-1 R(50)	635.3603	13-7 P(26)	635.3572		
	11-6 R(18)	635.3561	17-8 P(137)	635.3566		
			5-2 R(139)	635.3560		

动能级上的布居数分布是玻尔兹曼分布, 满足下式^[7]:

$$f_{\nu''} = \frac{e^{-h\nu_e(\nu''+\frac{1}{2})}}{\sum_{\nu''=0}^{\infty} e^{-\frac{h\nu_e}{KT}(\nu''+\frac{1}{2})}} = e^{-\frac{h\nu_e}{KT} \nu''} (1 - e^{-\frac{h\nu_e}{KT}}),$$

这里 ν'' 是基电子态振动量子数, ω_e 是碘分子振动常数, h 是普朗克常数, K 是玻尔兹曼常数, T 是绝对温度。取 $\omega_e \approx 210 \text{ cm}^{-1}$, $T = 293 \text{ K}$, 得到基电子态振动能级上的碘分子布居数分布如表 3 所示。 ν'' 越大, 分子布居数越小, 相应的吸收信号越弱。由表 3 可得 $f_0/f_1 \approx 1/4500$, 因而在表 2 中略去了 $\nu'' \geq 9$ 的计算结果。

表 3 碘分子在 $X' \Sigma_{0g}^+$ 电子态不同振动能级上的布居分布

Table 3 Population distribution of I_2 at different vibrational levels of the electronic state $X' \Sigma_{0g}^+$

ν''	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$f_{\nu''} (\times 10^{-4})$	2270	795	278	97.1	34.0	11.9	4.15	1.45	0.507

三、结 束 语

表 4 列出了国际米定义咨询委员会推荐的真空波长值^[1], 它们分别是测量的稳定在碘分子超精细谱线上的稳频氦氖激光器输出的绝对真空波长值。与表 2 中相应的计算结果比较, 可以看到计算值与实测值的误差在 5×10^{-7} 范围内。这表明表 2 的计算数据有相当好的参考价值。

表 4 计算值与实测值的比较

Table 4 Comparison of the calculated results with experimental data

激光谱线 (nm)	实测波长值 (nm)	计算波长值 (nm)
633 $^{127}I_2 R(147) 11-5$	<i>i</i> -分量: 632.9913981	632.9914
612 $^{127}I_2 R(47) 9-2$	<i>o</i> -分量: 611.9707698	611.9704

参 考 文 献

- [1] D. Kind; 17^e Conférence Générale des Poids et Mesures, (Octobre 1983).
- [2] 赵克功; 《计量学报》, (待发表)
- [3] M. Glaser, 赵克功; *Opt. Commun.*, 1981, **38**, No. 2 (Feb), 119.
- [4] P. Cèrez, S. J. Bennett; *Appl. Opt.*, 1979, **18**, No. 7 (Jul), 1079.
- [5] M. Tesic, Yoh Hanpa; *J. Mol. Spectrosc.*, 1975, **57**, No. 2 (Feb), 75.
- [6] P. Luc; *J. Mol. Spectrosc.*, 1980, **80**, No. 1 (Jan), 41.
- [7] 赵克功, 李桦; 《光学学报》, 1983, **3**, No. 8 (Nov), 673.

Ro-vibrational levels of iodine molecules at He-Ne laser lines

ZHAO KEGONG

LI HUA

(*Metrological Academy of China, Beijing*)

(*Department of Physics, Northwest University, Xian*)

(Received 2 November 1984)

Abstract

All of the possible ro-vibrational levels of $^{127}\text{I}_2$, $^{130}\text{I}_2$ and $^{127}\text{I}^{129}\text{I}$ at the nine He-Ne laser lines in the visible region have been calculated. These results provide the reference for further studying of hyperfine splitting and frequency-stabilization.