

Таблица 1.

Значения коэффициентов, входящих в кинетическую модель процесса ЛИФ РО

Параметр	Значение	Ссылка
$k_{13}(t)$	$\sigma_{13}F(t)$	
σ_{13}	$2 \cdot 10^{-17} \text{ см}^2$	[Бобровников и др., 2022]
$k_{31}(t)$	$k_{13}(t)/0,5$	
k_{31F}	$(3,77 \pm 0,06) \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}$	[Sausa et al., 1986]
k_{31Q}	$(1,00 \pm 0,09) \cdot 10^{10} \text{ с}^{-1}$	[Sausa et al., 1986]
k_{14}, k_{24}	$(6,77 \pm 2,82) \cdot 10^7 \text{ с}^{-1}$	[Wong et al., 1985]
k_{21}	$(8,46 \pm 1,13) \cdot 10^7 \text{ с}^{-1}$	[Shu et al., 2000]
b	0,98	[Long et al., 1985; Smyth, Mallard, 1982]

Здесь σ_{13} — сечение поглощения; $F(t)$ — плотность потока фотонов;

В расчетах длина волны возбуждающего излучения соответствует максимуму поглощения молекулы РО в области расположения канта ветви ($Q_{11} + P_{21}$) (324,61 нм) [Бобровников и др., 2022].

Решение системы уравнений было выполнено численно с помощью пакета прикладных программ *Matlab*. Аналогичная работа проделана для перехода $A^2\Sigma^+(v'=0) - X^2\Pi(v''=0)$. Результаты вычислений лазерного возбуждения оксида фосфора в состоянии $B^2\Sigma^+$ и $A^2\Sigma^+$ представлен ниже (рис. 2, рис. 3).

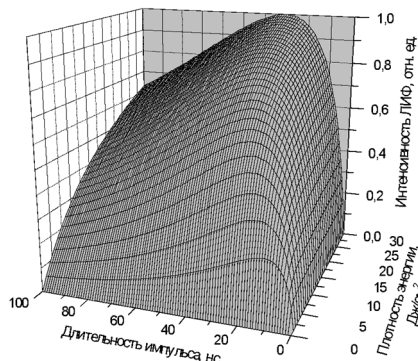


Рис. 2. Зависимость интенсивности флуоресценции молекул РО от длительности импульса и плотности энергии лазерного излучения, переход $B^2\Sigma^+(v'=0) - X^2\Pi(v''=0)$

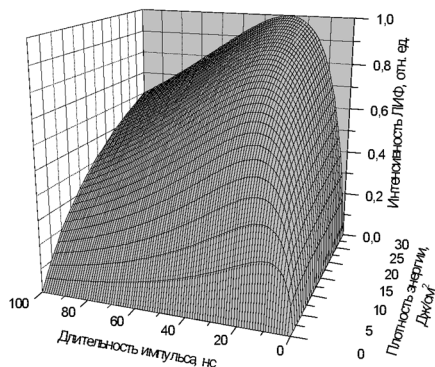


Рис. 3. Зависимость интенсивности флуоресценции молекул РО от длительности импульса и плотности энергии лазерного излучения, переход $A^2\Sigma^+(v'=0) - X^2\Pi(v''=0)$

Можно заметить, что зависимость сигнала флуоресценции от плотности энергии монотонно растет, стремясь к насыщению. Зависимость от длительности импульса имеет локальный максимум, ввиду взаимодействия РО с кислородом. Из результатов видно, что свойства переходов похожи, однако при сравнении не нормированных значений ожидаемых сигналов ЛИФ интенсивность флуоресценции при возбуждении перехода $A^2\Sigma^+(v'=0) - X^2\Pi(v''=0)$ оказывается более, чем на два порядка выше, нежели при возбуждении $B^2\Sigma^+(v'=0) - X^2\Pi(v''=0)$. Ввиду полученных результатов переход $A^2\Sigma^+(v'=0) - X^2\Pi(v''=0)$ был выбран в качестве основного рабочего при проведении экспериментов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 20-79-10297, <https://rscf.ru/project/20-79-10297/>.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Бобровников С.М., Горлов Е.В., Жарков В.И. Эффективность лазерного возбуждения РО-фотофрагментов органофосфатов // Оптика атмосферы и океана. 2021. Т. 35, № 3. С. 175–185.

Бобровников С.М., Горлов Е.В., Жарков В.И. и др. Оценка эффективности лазерного возбуждения перехода $B^2\Sigma^+(v'=0) - X^2\Pi(v''=0)$ оксида фосфора // Оптика атмосферы и океана. 2022. Т. 35, №5. С. 361–368.

Long S.R., Christesen S.D., Force A.P. Rate constant for the reaction of PO radical with oxygen // Chem. Phys. Lett. 1985. V. 84, N 10. P. 5965–5966.

Sankaranarayanan S. γ -Centroids and Franck-Condon factors for the bands of $A^2\Sigma-X^2\Pi$ system of PO molecule // Indian J. Phys. 1966. V. 40. P. 678–680.

Sausa T., Andrzej W., Long S. State distributions, quenching, and reaction of the PO radical generated in excimer laser photofragmentation of dimethyl methylphosphonate // J. Phys. Chemistry. 1986. V. 90, N 17. P. 3994–3998.

Shu J., Bar I., Rosenwaks S. NO and PO photofragments as trace analyte indicators of nitrocompounds and organophosphonates // App. Phys. B. 2000. V. 71, N 5. P. 665–672.

Smyth K.C., Mallard W.G. Two-photon ionization processes of PO in a C2H2/air flame // J. Chem. Phys. 1982. V. 77, N 4. P. 1779–1787.

Wong K.N., Anderson W.R., Kotlar A.J. et al. Lifetimes and quenching of $B^2\Sigma^+$ PO by atmospheric gases // J. Chem. Phys. 1985. V. 84, N 1. P. 81–90.

Yin Y., Shi D., Sun J. et al. Transition Probabilities of Emissions and Rotationless Radiative Lifetimes of Vibrational Levels for the PO Radical // Astrophys. J. Suppl. Ser. 2018. V. 236, N 34.