«*Квантовая электроника*», 7, № 5 (1980) УДК 621.378:621.373

В. И. Данилова, К. М. Дегтяренко, В. В. Грузинский, Т. Н. Копылова,
Г. В. Майер, В. Ф. Тарасенко

ГЕНЕРАЦИЯ ПАРОВ ПАРА-КВАТЕРФЕНИЛА ПРИ НАКАЧКЕ ИЗЛУЧЕНИЕМ XeCl*-ЛАЗЕРА*)

Предложен новый подход к поиску активных сред на основе теоретического исследования спектрально-люминесцентных и генерационных свойств органических молекул. Получена генерация пара-кватерфенила в газовой фазе ($\lambda_{ген}=361,5$ нм) с низким пороговым уровнем накачки (1,1 МВт/см²). Предсказана генерационная способность некоторых замещенных пара-кватерфенила.

Явление генерации света органическими молекулами в газовой фазе было открыто советскими исследователями [7]. В настоящее время генерация в парах получена примерно на 27 соединениях [2]. Наиболее коротковолновая генерация, по опубликованным данным, получена на парах пара-кватерфенила [2, 3]. Поиск новых веществ, эффективно генерирующих в газовой фазе, улучшение параметров генерации остаются актуальными задачами квантовой электроники. Успешное их решение невозможно без применения расчетных методов, в частности методов квантовой химии. Нами при решении задачи поиска новых органических соединений, генерирующих лазерное излучение, применен следующий подход [4]:

1. Теоретически рассчитывается электронная структура, спектры (в том числе спектры наведенного $S_1 \to S_n$ и $T_1 \to T_n$ поглощения) рядов сходно построенных молекул, среди которых есть молекулы, эффективно генерирующие лазерное излучение, и модельные молекулы.

2. Исходя из схемы энергетических уровней молекул, по формулам, выведенным в работах [5, 6], оцениваются константы безызлучательной дезактивации энергии электронного возбуждения K_{ST}, K_{BK}, время жизни возбужденного состояния $\tau_{рад}$, квантовый выход флуоресценции q.

3. Полученные теоретически характеристики молекул сопоставляются с экспериментальными параметрами излучения, в частности с $I_{ген}$ (интенсивностью излучения этих молекул в аналогичных условиях — широкополосный резонатор, идентичные условия регистрации, небольшие превышения мощности излучения накачки над пороговой). В этих условиях изменения $I_{ген}$ связаны с изменением структуры молекул, поэтому можно предсказать структуры, которые по совокупности всех указанных параметров будут перспективны в генерационном отношении и могут быть рекомендованы к синтезу.

Описанный подход применен нами при исследовании спектрально-люминесцентных и генерационных свойств фенилбензоксазолов в растворах. На фенилбензоксазоле нами [7] и одновременно авторами [8] получена самая коротковолновая генерация (330 нм). Ряд замещенных фенилбензоксазола был нами рекомендован к синтезу, и на новых молекулах получена генерация в области 327—450 нм [7, 9]. Теоретические данные, полученные нами для фенилбензоксазола и его замещенных, и спектроскопические исследования [10] показывают, что на этих соединениях возможна генерация в парах в более коротковолновой области спектра.

Исследования генерации органических молекул в парах открывают большие возможности в установлении корреляции между изменением структуры молекул и их генерационными свойствами. В связи с этим нами были проведены теоретические исследования пара-кватерфенила и его замещенных и экспериментальные исследования генерационных свойств паров. Эффективную генерацию пара-квантерфенила обеспечило применение для накачки эксимерного лазера на XeCl* ($\lambda=308$ нм), созданного на базе азотного лазера АИЛ-2 [11]. Равномерный разряд при повышенных давлениях обеспечивается за счет дополнительной подсветки. Поперечное сечение лазерной камеры показано на рис. 1, *а*. При подаче импульса напряжения на электроды за время запаздывания пробоя основного промежутка между сеткой *1*, которая служила катодом, и поверхностью диэлектрика *2*, охватывающего проводник *3*, соединенный с анодом *4*, развивался разряд, обеспечивающий УФ предыонизацию основного промежутка. Равномерный разряд в смеси He : Xe : $CHCl_3$=1 : 20 : 1800 сохранялся до давления 2,5 атм, а оптимальное давление смеси при зарядном напряжении 15 кВ составило 1,8 атм.

*) Доложено на сессии научного совета АН СССР по проблеме «Когерентная и нелинейная оптика», Ташкент, октябрь, 1979 г.

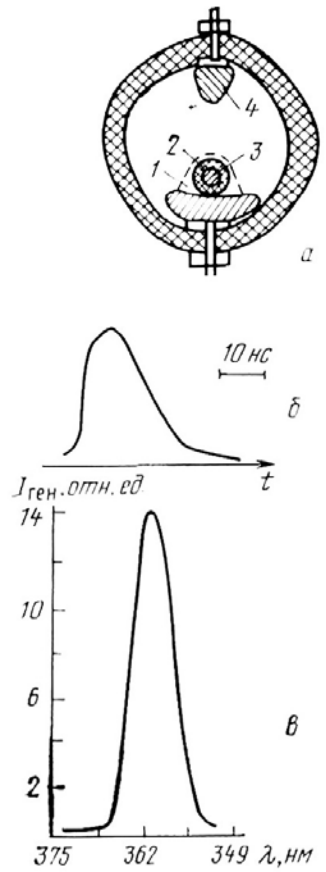

Рис. 1. Сечение лазерной камеры (*а*), осциллограмма импульса излучения эксимерного лазера на $XeCl^*$ (*б*) и спектр генерации пара-кватерфенила в газовой фазе ($T=$ $=220$ °С, давление пентана 70 атм) (*в*)

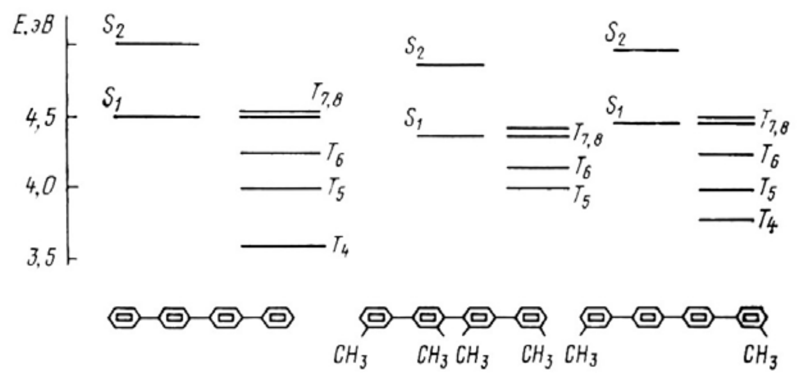

Рис. 2. Энергетическая схема электронных уровней пара-кватерфенила и его замещенных

Осциллограмма импульса излучения приведена на рис. 1, *б*. Для него характерен крутой фронт и более пологий спад. Энергия излучения зависела от давления и состава смеси, зарядного напряжения и достигала 8 мДж.

Исследование генерации пара-кватерфенила проводилось в кювете высокого давления с пентаном [2]. Использовался поперечный вариант накачки. Плотность возбуждающего излучения составляла 11 МВт/см². Резонатор длиной 9 мм был образован плоскими термостойкими диэлектрическими зеркалами с отражением 95 % в области 359—400 нм. Спектр генерации пара-кватерфенила при давлении пентана 70 атм и температуре 220° С приведен на рис. 1,*в* ($\lambda_{ген}=361{,}5$ нм). Ширина полосы генерации 18 нм. Пороговый уровень накачки был ниже, чем в работах [2, 3] (1,1 МВт/см²), что, по-видимому, обусловлено оптимальным источником возбуждения ($\lambda_{нак}$ практически совпадает с максимумом поглощения, фронт импульса накачки крутой).

С целью дальнейшего расширения генерирующих в парах соединений на основе пара-кватерфенила в рамках π-электронного приближения был проведен расчет положения синглетных и триплетных электронных термов, положения и интенсивности спектров перепоглощения, а также оценены значения констант скоростей радиационного распада $K_r=10^9$ с$^{-1}$, внутренней $K_{ВК}=10^4$ с$^{-1}$ и интеркомбинационной $K_{ST}=$ $=10^8$ с$^{-1}$ конверсии в пара-кватерфениле и его замещенных (рис. 2). Из анализа расчетных данных видно, что всем изученным соединениям свойственны большая сила осциллятора излучательного перехода, относительно малые значения констант скоростей процессов безызлучательной конверсии возбужденного состояния, а также, в случае пара-кватерфенила, неперекрывание спектров синглет-синглетного и триплет-триплетного перепоглощения и генерации. Это согласно [12, 13] объясняет высокую генерационную эффективность пара-кватерфенила, а также, учитывая, что введение групп CH_3 в молекулу пара-кватерфенила не должно привести к значительному сдвигу полосы генерации (в область перекрывания со спектрами перепоглощения), позволяет предсказать генерационную способность его замещенных.

1. Н. А. Борисевич, И. И. Калоша, В. А. Толкачев. *ЖПС*, **19**, 1109 (1973).
2. Н. А. Борисевич, А. Л. Гореленко, И. И. Калоша, В. А. Поведайло. *ЖПС*, 5, 906 (1978).
3. В. С. Зуев, О. А. Логунов, Ю. В. Савинов, А. В. Старцев, Ю. Ю. Стойлов. *Appl. Phys.*, 17, 321 (1978).

4. О. К. Базыль, В. В. Грузинский, В. И. Данилова, Т. Н. Копылова, Г. В. Майер. Всес. совещание по квантовой химии. Новосибирск, 1978, с. 17.
Г. В. Майер, Т. Н. Копылова, В. И. Данилова. Тезисы докл. конф. по теории атомов и молекул. Вильнюс, 1979, с. 47.
В. И. Данилова, Г. В. Майер, Т. Н. Копылова, И. В. Соколова, там же, с. 53.
5. В. Г. Плотников, Б. А. Долгих. *Оптика и спектроскопия*, **43**, 882 (1977).
6. В. Г. Плотников, Б. А. Долгих, В. М. Комаров. *Оптика и спектроскопия*, **43**, 1072 (1977).
7. Л. А. Баркова, В. В. Грузинский, В. И. Данилова, Т. Н. Копылова, П. И. Петрович, Е. Ю. Шишкина. Препринт ИФАН БССР, Минск, 1978, № 169.
8. C. Rulliere, J. Joussot-Dubien. *Optics Comms*, **24**, 38 (1978).
9. Л. А. Баркова, В. В. Грузинский, В. И. Данилова, Т. Н. Копылова, П. И. Петрович, Е. Ю. Шишкина. Препринт ИФАН. Минск, 1978, № 169.
10. Л. А. Баркова, В. Г. Грузинский, П. И. Петрович, Е. Ю. Шишкина. *ЖПС*, **1**, 651 (1979).
11. В. Ф. Тарасенко, В. Ф. Лосев, Ю. М. Бычков. *Квантовая электроника*, **1**, 2285 (1974).
12. Б. И. Степанов, А. Н. Рубинов. *УФН*, **95**, 45 (1968).
13. Н. А. Борисевич, В. В. Грузинский. В кн.: Квантовая электроника и лазерная спектроскопия./Под ред. Б. И. Степанова, А. М. Самсона. — Минск: ИФ АН БССР, 1971, с. 81.

Институт сильноточной электроники
СО АН СССР, Томск

Поступило в редакцию
14 ноября 1979 г.

V. I. Danilova, K. M. Degtyarenko, V. V. Gruzinski, T. N. Kopylova, G. V. Maier, V. F. Tarasenko. **Laser Action in Para-Quaterphenyl Vapors Under Pumping by the XeCl* Laser Radiation.**

A new approach is suggested to the search for active media on the basis of theoretical studies into spectral-luminescent and lasing properties of organic molecules. Laser action has been achieved in gas-phase para-quaterphenyl ($\lambda_1 = 361.5$ nm) with a low threshold pump level (1.1 MW/cm^2). Lasing ability is predicted of some substitutes of para-quaterphenyl.

«Квантовая электроника», **7**, № 5 (1980) УДК 621.378

М. Г. Резников, А. И. Хижняк

О СВОЙСТВАХ РЕЗОНАТОРА С ЗЕРКАЛОМ, ОБРАЩАЮЩИМ ВОЛНОВОЙ ФРОНТ

В параксиальном приближении изучаются структура типов колебаний и собственные частоты резонатора с зеркалом, обращающим волновой фронт. Показано, что при заполнении этого резонатора линейной и взаимной средой основной тип колебаний обладает меньшими потерями по сравнению с основными типами колебаний любых заполненных резонаторов, образованных обычными зеркалами таких же размеров. Отмечается отсутствие в резонаторе выделенных собственных частот.

Проблема эффективного управления пространственной структурой лазерного излучения не утратила своей актуальности до настоящего времени. Любые методы ограничения апертуры либо пространственного спектра лазерного пучка в случае оптически неоднородной активной среды приводят к уменьшению яркости излучения, иногда существенному. С целью уменьшения дифракционных потерь резонатора лазера для заданной структуры пучка в работах [1, 2] было предложено в качестве одного из зеркал резонатора использовать зеркало, обращающее волновой фронт (ОВФ), способное компенсировать оптические неоднородности активной среды [3]. Теоретическое исследование «пустого» резонатора с зеркалом ОВФ [4, 5] показало, что резонатору присущи многие свойства традиционных открытых резонаторов: наличие дискретного спектра поперечных мод, потери которых возрастают с номером моды, эквивалентность по потерям и структуре мод резонаторов, имеющих разные геометрические размеры, но один и тот же набор некоторых безразмерных параметров, и т. п.