

**МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ М.В.
ЛОМОНОСОВА
НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ
ИМЕНИ Д.В. СКОБЕЛЬЦЫНА**

Е. А. Крылова, А. А. Чукаловский, Т. В. Рахимова, К.С.Клоповский

**ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ ИНВЕРСИИ
НА ЛАЗЕРНОМ ПЕРЕХОДЕ АТОМА ЙОДА В СМЕСИ
МОЛЕКУЛЯРНОГО ЙОДА И КИСЛОРОДА,
ВОЗБУЖДЕННОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ РАЗРЯДОМ.**

Препринт НИИЯФ МГУ - 2008 -3/839

Москва – 2008

УДК: 533.92, 533.9.001

Е. А. Крылова, А. А. Чукаловский, Т. В. Рахимова, К. С. Клоповский

E-mail: ELENA.KRYLOVA@inbox.ru

Preprint of Institute of Nuclear Physics № 2008-3/829

Е.А.Крылова, А.А.Чукаловский, Т.В.Рахимова, К.С.Клоповский

Численный анализ процессов формирования инверсии на лазерном переходе атома йода в смеси молекулярного йода и кислорода, возбужденного электрическим разрядом.

Аннотация.

Проведен параметрический анализ основных кинетических механизмов формирования инверсии на лазерном переходе атома йода на основе квазидвумерной диффузионной модели. Параметрическое исследование кинетики химических процессов при смешении потоков показало, что температурный режим является основным фактором, влияющим на инвертирование перехода в атоме йода. Определены основные процессы, приводящие к разогреву системы.

Анализ показал, что снижение концентрации атомарного кислорода является одним из основных условий формирования инверсии на переходе атома йода. Отмечено, что рост давления в возбужденном потоке кислорода приводит при таком способе смешения к появлению неоднородного распределения коэффициента усиления по радиусу на всей длине зоны смешения.

Проведён анализ влияния вариации содержания молекулярного йода при смешении потоков на температуру и коэффициент усиления.

Показано, что увеличение степени предварительной диссоциации I_2 вне зоны смешения позволяет снизить нагрев смеси газа, тем самым добиться увеличения коэффициента усиления.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ-№06-02-16537 и Гранта НШ-133.2008.2.

E.A.KriloVA, A.A.Chukalovsky, T.V.Rakhimova, K.S.Klopovsky

Numerical analysis of formation of population inversion at the atomic iodine laser transition into molecular iodine-oxygen mixture excited with electrical discharge.

Abstract.

Detailed analysis of mixing kinetics in post-discharge plasma was carried out by using quasi-two-dimensional diffusion model developed. Parametric study of chemical kinetics of mixing flows indicated temperature to be the critical issue of population inversion. General heating processes were found.

Lowering concentration of atomic oxygen was shown to be one of the main circumstances reacting on iodine population inversion. Increase in pressure of excited oxygen flow was pointed out to produce an inhomogeneous distribution of radial gain profile through the whole length of mixing zone in such way of mixing.

Analysis of variation of molecular iodine concentration influence on temperature and gain was carried out.

Increasing of the molecular iodine pre-dissociation prior to injection was shown to reduce heat of gas admixture and so raise the gain.

This work was executed by support grant RFBF - N 06-02-16537 and НШ-133.2008.2.

© Е. А. Крылова, А. А. Чукаловский,
Т. В. Рахимова, К. С. Клоповский, 2008-3/839
© НИИЯФ МГУ, 2008

СОДЕРЖАНИЕ

1.	Введение	4
2.	Некоторые особенности возбуждения генерации КИЛ с ХГСК и ЭРГСК.	6
3.	Описание модели.	9
4.	Анализ основных кинетических процессов.	13
5.	Вариация степени охлаждения кислородного потока и предварительной диссоциации I_2 .	15
6.	Вариация содержания атомарного кислорода	17
7.	Оптимизация содержания I_2 в зоне смешения.	21
8.	Заключение.	23
9.	Литература	24
10.	Приложение. Схема химических реакций.	25

1. Введение.

Создание в 1978 г. [1] непрерывного химического кислород-йодного лазера (ХКИЛ) стало одним из наиболее важных достижений в области создания мощных газовых лазеров. Генерация в ХКИЛ достигается за счёт создания инверсии в атомарном йоде на переходе ${}^2P_{1/2} \rightarrow {}^2P_{3/2}$ в результате передачи энергии от метастабильного синглетного состояния ($a^1\Delta_g$) молекул кислорода (СК) атомарному йоду. В (ХКИЛ) молекулы СК нарабатываются в цикле химических реакций с участием молекулярного хлора, перекиси водорода и щелочи [2]:

Уникальность КИЛ заключается в том, что он обладает достаточно малой длиной волны излучения ($\lambda=1.315$ мкм), узкой линией генерации и высоким качеством излучения. Эти характеристики делают этот лазер весьма перспективным для применения в технологических целях. Привлекательные особенности КИЛ сделали его объектом активного исследования в научных лабораториях по всему миру. В результате многочисленных исследований созданы мощные химические КИЛ непрерывного действия, которые характеризуются высокой мощностью генерации Р, достигающей единиц мегаватт, и обладают высокой эффективностью преобразования химической энергии в энергию лазерного излучения $\sim 30\%$ [2]. В современных типах ХГСК, обеспечивается выход СК порядка 50÷80% при давлениях кислорода от единиц до десятков Тор [2]. Значения коэффициента усиления, полученные в КИЛ с ХГСК, составляют порядка $\sim 10^{-3} \div 10^{-2}$ см⁻¹ [2, 3].

Однако, несомненные достоинства ХКИЛ нивелируются тем, что в нем для наработки синглетного кислорода (СК) используются экологически опасные и токсичные компоненты влажной химии - хлор, перекись водорода и щелочь. Кроме того, технологически химический способ наработки СК предполагает громоздкие размеры кислород-йодной лазерной системы с ХГСК [2].

Альтернативой химической наработке СК, является электрический разряд в кислород-содержащих газовых смесях, в котором молекулы СК получают при возбуждении молекул кислорода электронным ударом. В этом отношении электроразрядный генератор СК (ЭР ГСК) является экологически чистым, так как в нем не используются токсичные компоненты. В работе [3] показано, что химическая эффективность η_{chem} (отношение выходной мощности лазера к мощности, вкладываемой в ГСК) для КИЛ с ЭРГСК может достигать $\sim 25\%$, что сравнимо с химической эффективностью сегодняшних классических ХКИЛ. А при одном и том же выходе СК параметр η_{chem} для КИЛ с электрическим иницированием СК примерно в 1.5 раза больше, чем с химическим, поэтому энергозатраты на 1 кВт выходной мощности лазера с ЭР ГСК гораздо меньше, чем у ХГСК

Наибольшие успехи в создании ЭР ГСК достигнуты при использовании в качестве источника плазмы RF и MW разрядов. В работах [4,5] было показано, что содержание СК в кислородном потоке на выходе из таких разрядных систем может превышать пороговое значе-

ние содержания СК Y_{th} , достаточное для возбуждения генерации КИЛ. Например, в работе [4] выход СК из генератора на ВЧ разряде составлял $Y=17\%$, в работе [5] в MW разряде было получено $Y\approx 21\%$. В работах [6,7] значения выхода СК достигали 21% и 32% при инициировании плазмы в MW и RF разряде, соответственно, при парциальных давлениях кислорода (3÷4) Тор.

Рядом исследовательских групп были проведены экспериментальные исследования по возбуждению генерации КИЛ с помощью ЭРГСК. Впервые, в CU Aergospace в США [8] была показана возможность получения непрерывной генерации кислород-йодного лазера, возбуждаемого ЭРГСК, при парциальном давлении кислорода ≈ 2 Тор и степени возбуждения кислородного потока, полученной в RF разряде, $Y\approx 16\div 18\%$. В настоящее время, помимо результатов работы [8], в работах [9,10] представлены результаты по генерации в системе с ЭРГСК, когда выход СК составлял $Y\approx 5\%-5.7\%$ при давлении в десятки Тор. Генерация была получена за счёт глубокого ($\sim 120K$) охлаждения смеси при сверхзвуковом смешении потока йода с возбуждённым кислородом.

Успешная демонстрация работы КИЛ с ЭРГСК [8] стимулирует проведение исследований по масштабированию ЭРГСК по давлению. В настоящее время проводятся интенсивные работы по созданию эффективных электроразрядных генераторов синглетного кислорода (ЭРГСК), работающих при повышенных (>5 Тор) давлениях кислорода [11,12]. Использование непрерывного поперечного ВЧ разряда высокой частоты (81 МГц) [12] в качестве ЭРГСК позволило получить рекордные результаты по наработке СК в чистом кислороде: $Y\approx 21\%$, 17% и 13% при 10, 20 Тор и 30 Тор кислорода, соответственно. Однако, как показали эксперименты, наработка СК в ВЧ разряде сопровождается диссоциацией молекулярного кислорода, причем с повышением энерговклада степень диссоциации O_2 становится сравнимой со степенью возбуждения СК [13,14]. Присутствие атомарного кислорода в разрядной зоне ЭРГСК может существенно изменить кинетику процессов в зоне смешения КИЛ.

По этой причине актуальным является детальное изучение кинетики процессов с участием атомарного кислорода в зоне смешения КИЛ с ЭРГСК при повышенных давлениях возбужденного потока кислорода, а также оптимизация по составу возбуждаемого ЭРГСК кислородного потока и параметров йодсодержащего газового потока в зоне смешения КИЛ.

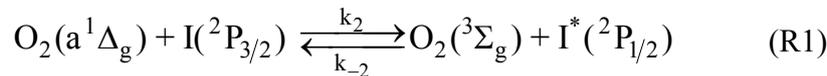
В данной работе представлены результаты численного моделирования кинетики процессов, приводящих к формированию инверсной населенности на лазерном переходе $^2P_{1/2} \rightarrow ^2P_{3/2}$ в атоме йода при подмешивании молекулярного йода в возбужденный в ЭРГСК кислородный поток.

2. Некоторые особенности возбуждения генерации КИЛ с ХГСК и ЭРГСК.

В этом разделе мы кратко проанализируем основные особенности возбуждения генерации и различия в кинетике формирования инверсной населенности в КИЛ с использованием ХГСК и ЭРГСК.

В ХГСК получение необходимой для работы КИЛ концентрации $O_2(a^1\Delta_g)$ основывается на реакции хлорирования щелочного раствора перекиси водорода [2]. Поток, выходящий из ХГКС, содержит, в основном, молекулы O_2 , $O_2(a^1\Delta_g)$ и примеси H_2O , H_2O_2 , Cl_2 . Как уже указывалось, концентрация СК на выходе ХГСК достигает 50÷80%. Далее газовый поток из ХГСК подается в камеру смещения, куда через систему инжекторов впрыскивается смесь, содержащая молекулярный йод I_2 . В результате взаимного перемешивания образуется рабочая смесь КИЛ, в которой I_2 диссоциирует в химических реакциях с участием $O_2(a^1\Delta_g)$ [1,2].

Генерация в кислород-йодном лазере осуществляется на электронном переходе атома йода $I^*(^2P_{1/2}) \rightarrow I(^2P_{3/2}) + h\nu$ за счет почти резонансной передачи энергии возбуждения от молекул СК на основное состояние атома йода:



Дефект энергии между состояниями $O_2(a^1\Delta_g)$ и $I^*(^2P_{1/2})$ составляет 0.04 эВ или ~ 402 К. В результате прямой и обратной реакций (R1) устанавливается равновесие в смеси кислорода и атомарного йода с константой равновесия K_{eq} :

$$K_{eq} = \frac{[I(^2P_{1/2})][O_2(^3\Sigma_g^-)]}{[O_2(a^1\Delta_g)][I(^2P_{3/2})]} = \frac{3}{4} \exp\left(\frac{401.4}{T}\right) \quad (1)$$

где T - температура газа. Для существования инверсии на переходе йода $I^*(^2P_{1/2}) \rightarrow I(^2P_{3/2})$ необходимо выполнение условия [2]:

$$\frac{[I^*(^2P_{1/2})]}{[I(^2P_{3/2})]} \geq \frac{g^*}{g} = \frac{1}{2} \quad (2)$$

где g и $g^* = 24$ и 12 - статистические веса основного и возбужденного уровней соответственно. Соотношение (1) определяет пороговое содержание Y_{th} синглетного кислорода $O_2(a^1\Delta_g)$, необходимое для возникновения инверсии на переходе атома йода [2,3]. Из (1) и (2) следует:

$$Y_{th} = \frac{[O_2(a^1\Delta_g)]}{[O_2(^3\Sigma_g^-)] + [O_2(a^1\Delta_g)]} = \frac{1}{1 + 2K_{eq}} = \frac{1}{1 + 1.5 \exp\left(\frac{401.4}{T}\right)} \quad (3)$$

На Рис.1 изображена зависимость Y_{th} от температуры смеси.

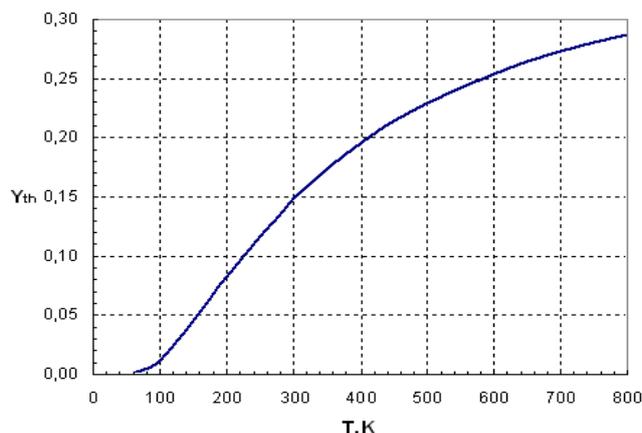
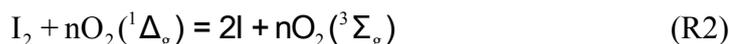


Рис. 1. Пороговое содержание СК - Y_{th} в зависимости от температуры газовой смеси.

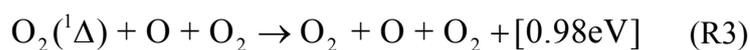
При температуре $T=300\text{K}$ необходимый минимум содержания СК составляет $Y_{th} = 0.15$. Так как на выходе ХГСК содержание СК составляет более 50%, то создание инверсии на лазерном переходе КИЛ не встречает принципиальных трудностей (см. обзор [2]). Стоит, однако, подчеркнуть, что энергетическая эффективность КИЛ во многом определяется температурным режимом рабочей смеси. Как уже указано выше, обычно источником атомов йода в КИЛ является молекулярный йод, диссоциирующий при смешивании с СК. В общем виде, исключая промежуточные этапы, процесс диссоциации можно записать как [2]:



При этом на разложение одной молекулы I_2 требуется ≈ 6 молекул $O_2(^1\Delta_g)$. Таким образом, энергия, запасенная в молекулах СК, расходуется не только на создание инверсии на лазерном переходе, но и на диссоциацию I_2 . Избыток энергии в реакциях (R2) выделяется в тепло. Другим существенным источником роста температуры в лазерной среде КИЛ являются процессы тушения $O_2(^1\Delta_g)$ примесями H_2O , H_2O_2 , Cl_2 в процессе перемешивания газовых потоков в зоне смешения.

Ситуация с использованием ЭРГСК для возбуждения генерации КИЛ существенно сложнее. К настоящему времени созданы эффективные ЭРГСК, работающие при повышенных (>5 Тор) давлениях кислорода [12,13]. Использование непрерывного поперечного ВЧ разряда высокой частоты (81 МГц) [13] в качестве ЭРГСК позволило получить рекордные результаты по наработке СК в чистом кислороде: $Y \approx 21\%$, 17% и 13% при 10, 20 Тор и 30 Тор кислорода, соответственно. Дальнейшее увеличение выхода СК из ЭРГСК ограничивается рядом факторов, связанных с особенностями работы ЭРГСК.

Как показали эксперименты, наработка СК в ВЧ разряде сопровождается диссоциацией молекулярного кислорода, причем с повышением энерговклада степень диссоциации O_2 становится сравнимой со степенью возбуждения СК. Было установлено [11-13], что повышение вкладываемой в ВЧ разряд мощности приводит к насыщению концентрации СК из-за тушения СК атомарным кислородом $O(^3P)$ в трёхтельной реакции [11]:



За счет снижения концентрации атомарного кислорода в среде можно снизить скорость тушения $O_2(a^1\Delta_g)$ в реакции (R3) и, тем самым, увеличить выход СК. Такая возможность продемонстрирована в работах [8,11-13] за счет связывания атомарного кислорода в гетерогенных [11,12] и объемных [8] процессах. Однако, теоретические оценки и модельные расчеты, проведенные в работе [14], свидетельствуют о том, что существует принципиальное ограничение на степень возбуждения СК в электрических разрядах, которое связано с процессом диссоциации молекул СК электронным ударом. На Рис.2 представлены результаты расчетов [14] максимальной энергетической эффективности возбуждения δ_e и максимальной степени возбуждения Y_{max} СК от средней энергии электронов T_e .

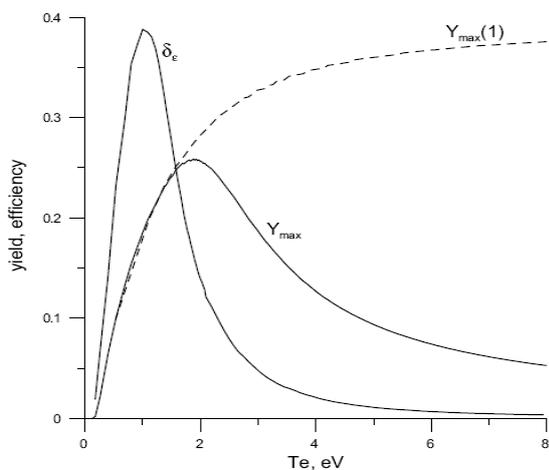


Рис.2. Максимальный выход СК Y_{max} и энергетическая эффективность δ_e в зависимости от средней энергии электронов T_e [14].

Из Рис.2 видно, что $\delta_e(T_e)$ имеет максимум при $T_e \approx 1$ eV и падает с ростом T_e . Кривая $Y_{max}(1)$ получена без учета процессов диссоциации СК. Учет этих реакций при расчете приводит к возникновению максимума $Y \approx 25\%$ при $T_e \approx 2$ эВ.

Следует отметить, что эффективность использования ЭРГСК в КИЛ определяется возможностью создания в кислородсодержащем потоке степени возбуждения Y превосходящей пороговое значение содержания Y_{th} для возбуждения генерации при наименьших энергозатратах. Сопоставление рекордных результатов [12] с пороговыми значениями Y_{th} (Рис.1), показывает, что инвертирование перехода $^2P_{1/2} \rightarrow ^2P_{3/2}$ в атоме йода возможно при температурах газа $T_g < 440$ К при $P=10$ Тор, $T_g < 340$ К - $P=20$ Тор, $T_g < 260$ К - $P=30$ Тор. Таким образом, инвертирование лазерного перехода КИЛ с использованием реальных ЭРГСК очень чувствительно к температуре в рабочей смеси.

Присутствие атомарного кислорода в потоке на выходе из ЭРГСК, приводит к эффективному тушению $O_2(a^1\Delta_g)$ в трёхтельной реакции (R3). С ростом давления кислорода этот процесс вносит существенный вклад в разогрев среды. Кроме того, было показано в [8], что атомы O могут эффективно тушить возбуждённое состояние атомов I в реакции:



Это процесс негативным образом влияет на создании инверсии на лазерном переходе йода в рабочей смеси и приводит к дополнительному росту температуры.

Таким образом, для определения возможности использования недавно созданных ЭРГСК нового поколения, работающих при повышенных давлениях кислорода ($P > 5$ Тор) с содержанием СК $\approx 20\%$, необходимо тщательно проанализировать температурный режим смеси, реализующийся при перемешивании потока, содержащего молекулярный йод, с кислородсодержащим потоком, возбужденным в ЭРГСК.

Для решения поставленной задачи построена модель смешения потоков в КИЛ с ЭРГСК, которая достаточно адекватно описывает с одной стороны сам процесс перемешивания потоков - возбуждённого кислорода и йодсодержащего газа, а вместе с тем учитывает все известные на сегодняшний день физико-химические процессы, происходящие в зоне смешения КИЛ с ЭРГСК. Модель описывает осесимметричное перемешивание потока возбужденного кислорода и потока He : I₂.

С помощью разработанной модели проведено численное исследование кинетических процессов при давлениях кислорода 5 и 10 Тор. Варьировалась концентрация атомов O(³P), концентрация и степень диссоциации молекулярного йода. Расчеты проводились при содержаниях O₂(¹Δ_g), близких к рекордным для ВЧ ЭРГСК [12, 13]. Основная цель работы состояла в определении основных кинетических механизмов формирования инверсной населенности на лазерном переходе и возможности оптимизации параметров смешиваемых потоков

3. Описание модели.

Анализ кинетических процессов проведен для модельного устройства, на котором проводились экспериментально исследовались детали кинетики формирования инверсии в атоме йода и измерения коэффициента усиления и температуры смеси [15]. Схема модельного устройства представлена на Рис.3.

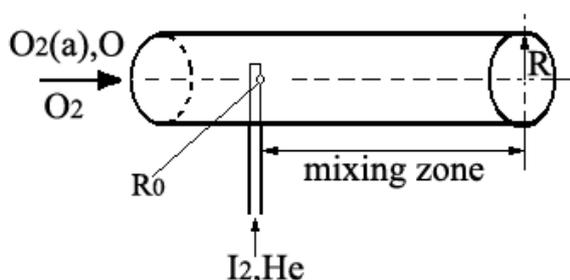


Рис.3. Схема модельного устройства.

Через кварцевую трубку радиуса R прокачивается дозвуковой возбужденный в ЭРГСК

поток кислорода. В этот поток через одиночный инжектор осесимметрично впрыскивается смесь молекулярного йода с гелием. Анализ проводится при следующих предположениях. Течение газа полагается установившимся, скорость прокачки газа – постоянной. Инжекция смеси $I_2:He$ осуществляется через отверстие радиуса R_0 , при давлении P_0 . На первой стадии впрыскиваемая смесь адиабатически расширяется до давления P_{O_2} , равного давлению кислорода, температуры T_{inj} и радиуса инъекции $R_{inj} > R_0$, на второй - происходит перемешивание потоков за счет радиального тепло - и массопереноса. Математическая модель, которая описывает такое диффузионное перемешивание потоков при постоянном давлении, включает в себя уравнение теплопроводности и систему уравнений непрерывности для компонент смеси: I_2 , $I_2(vib)$, $I_2(B^3\Pi)$, I^* , I , IO , $O_2(^1\Delta_g)$, $O_2(b^1\Sigma_g^+)$, O_2 , $O(^3P)$, O_3 в цилиндрической симметрии:

$$v_f \frac{\partial}{\partial z} n_i + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(-D_i \frac{\partial n_i}{\partial r} - D_i^T \frac{n_i}{T} \frac{\partial T}{\partial r} \right) = \sum_i R_i, \quad (4)$$

$$v_f \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(-\frac{\lambda}{\sum_i n_i C_{p_i}} \frac{\partial T}{\partial r} - \sum_i \left(D_i^T \frac{T}{n_i} \frac{\partial n_i}{\partial r} \right) \right) = \frac{\sum_i R_i \Delta_i}{\sum_i n_i C_{p_i}};$$

с граничными условиями:

$$\left(D_i \frac{\partial n_i}{\partial r} \right)_{r=R} = -\frac{\gamma_i v_T n_i}{4}, T_{r=R} = T_{st}; \quad (5)$$

$$(n_i)_{z=0} = \begin{cases} \eta_i \frac{P}{k_b T_{inj}}, r < R_{inj} \\ \chi_i \frac{P}{k_b T_{ox}}, R_{inj} < r < R \end{cases}, T_{z=0} = \begin{cases} T_{inj}, r < R_{inj} \\ T_{ox}, R_{inj} < r < R \end{cases}$$

где n_i – концентрации компонент смеси, T - температура газа, C_{p_i} – изобарная теплоемкость компонент газовой смеси, R_i – скорости химических реакций, Δ_i – дефекты химических реакций, v_f – эффективная скорость потока газа, γ_i - вероятность поверхностной реакции с участием i -ой компоненты смеси на стенке трубки, v_T - тепловая скорость частиц, R – радиус кварцевой трубки (2.5 см), T_{wall} - температура стенки трубки, P , T_{ox} - давление и температура потока кислорода, T_{inj} и R_{inj} – температура и радиус потока $I_2:He$ после адиабатического расширения, k_b – постоянная Больцмана, χ_i и η_i – содержание компонент в потоке кислорода и в потоке $I_2:He$ соответственно, z – транспортная координата. Коэффициенты переноса: D_i - диффузии, D_i^T – термодиффузии, λ - теплопроводности - рассчитывались в соответствии с процедурой, изложенной в [16] с использованием коэффициентов Леннарда - Джонса для каждой из компонент газа [17].

Коэффициент усиления на сверхтонком переходе атома йода ($F=3 \rightarrow F=4$) рассчиты-

вался с помощью известного соотношения для коэффициента усиления (поглощения) слабого сигнала – G_{34} (см. [2, 18]):

$$G_{34} = \frac{7}{12} \left(\frac{\lambda_{34}^2 \times A_{34}}{8\pi} \right) \times \left(\frac{[\Gamma^*(^2P_{1/2})]}{2} - \frac{1}{2} [\Gamma(^2P_{3/2})] \right) \times \varphi(\omega_{34}) =$$

$$= B_0 \times [\Gamma(^2P_{3/2})] \times \left[\frac{[\Gamma^*(^2P_{1/2})]}{[\Gamma(^2P_{3/2})]} - \frac{1}{2} \right] \quad (6)$$

где λ_{34} ; ω_{34} - длина волны и частота $F=3 \rightarrow F=4$ перехода, A_{34} - коэффициент Эйнштейна лазерного перехода, $\varphi(\omega_{34})$ - функция Фойгта.

В модель включена полная система химических реакций для КИЛ с ЭРГСК [15], в которую дополнительно введены новые реакции (R3, R4). Схема реакций приведена в Таблице 1.

Разработанная модель позволяет получать пространственное (r, z) распределение продуктов реакций, температуры среды и коэффициента усиления G . Следует отметить, что в данной модели не рассчитывается поле скоростей при смешивании потоков. Движение газовой смеси вдоль оси z задается с помощью эффективной скорости v_f . Эффективный радиус R_{inj} и температура T_{inj} инжектируемого потока являются параметрами задачи. По этой причине модель является упрощенной квазидвумерной моделью перемешивания двух осесимметричных потоков.

Для тестирования было проведено сравнение результатов, полученных с помощью представленной модели, с экспериментальными результатами измерения коэффициента усиления и температуры смеси [15] и численными расчётами на полной газодинамической модели Blaze-II [19] для давления кислорода ≈ 1.94 Тор.

Тестирование производилось при следующих условиях. Давление в потоке кислорода равнялось – $P_{O_2} = 1.94$ Тор, содержание СК в потоке полагалось равным - $Y = 16\%$, содержание атомарного кислорода составляло - $\chi(O) = 16\%$, а доля молекул $O_2(^1\Sigma)$ - $\chi(O_2(^1\Sigma)) = 2\%$. Впрыскиваемый поток содержал смесь $I_2:He = 1:40$. Расход потока кислорода составлял 5 ммоль/с, а потока $I_2:He$ – 1.025 ммоль/с. Температура возбуждённого потока кислорода в эксперименте измерялась термопарой, а также спектроскопически и в точке инъекции $I_2:He$ составляла ≈ 340 К. Инъекция йодсодержащего потока происходила через отверстие диаметром 0.238 см при температуре газа ≈ 340 К.

Стартовая точка расчётов на модели Blaze-II – точка инъекции потока $I_2:He$. Как уже было сказано, расчёты с помощью разработанной модели проводились в предположении, что инжектируемый поток адиабатически расширяется до давления, равного давлению кислорода, и параметров R_{inj} , T_{inj} и v_f . Эффективный радиус R_{inj} и температура T_{inj} инжектируемого потока, эффективная скорость потока v_f и глубина проникновения (координата z_0 , где про-

исходит выравнивание профиля скорости потока) являются параметрами задачи. Заданием этих параметров в разработанной модели определяется граничное условие для расчёта смеси после адиабатического расширения потока I_2 :He в предположении диффузионного перемешивания. Стартовой точкой расчётов на представленной квазидвумерной модели являлась точка, где выравнивались давления впрыскиваемого (йодсодержащего) потока и кислородного потока. На Рис.4. представлены результаты тестирования модели на экспериментальные данные по измерению G [15] и результаты численных расчетов [15] с использованием газодинамической модели Blaze-II. Наилучшие результаты расчётов коэффициента усиления G и температуры смеси T в сравнении с экспериментальными данными [15] были получены при параметрах: $R_{inj}=0.4$ см, $T_{inj}=240$ К и $v_f=100$ м/с.

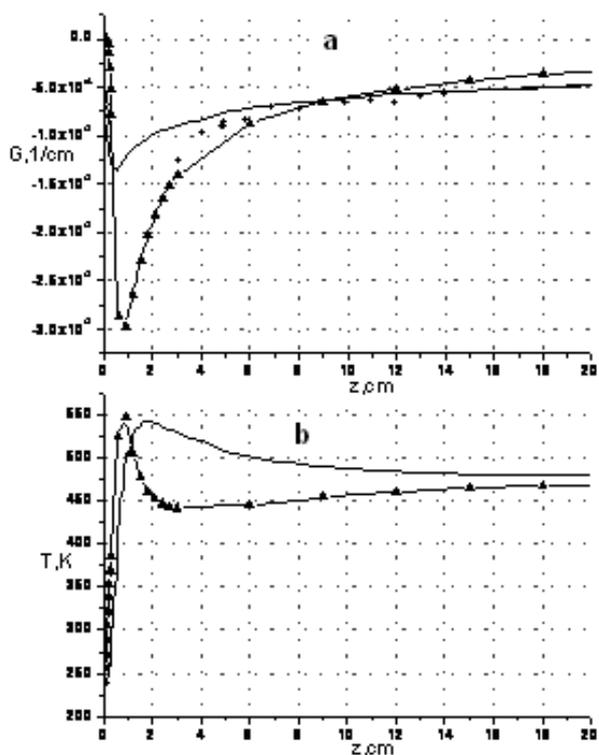


Рис.4. Распределение G - (a) и температуры смеси - (b) (на оси по длине зоны смешения. $P=1.94$ Тор, $T_{Ox}=340$ К, $Y=16\%$, $\chi(O)=16\%$, $\eta(I_2)/\eta(He)=1/40$. Сплошной линией обозначен результат расчёта на модели Blaze-II из работы [15], точками – экспериментальные данные [15], линией с треугольными символами - расчёт с использованием квазидвумерной диффузионной модели.

Из Рис.5. видно, что представленная модель довольно удовлетворительно передает основные тенденции изменения профилей коэффициента поглощения и температуры от транспортной координаты z . Сравнение результатов показывает, что при разумном выборе параметров задачи данная модель достаточно неплохо описывает основные особенности перемешивания дозвуковых потоков кислорода и смеси I_2 :He. Различия в положении максимумов температуры и коэффициента поглощения между расчётами на квазидвумерной диффузионной модели и расчетами [15] объясняются рядом факторов, которые не были учтены при построении модели. В частности, в представленной модели не рассчитывается поле скоростей при смешении

нии потоков и не совсем корректно учитывается переноса массы и тепла в аксиальном направлении

4. Анализ основных кинетических процессов.

С использованием протестированной модели проведён параметрический анализ кинетических процессов при смешении потоков, кинетики формирования инверсии на переходе $I^*(^2P_{1/2}) \rightarrow I(^2P_{3/2})$ атома йода и определение основных процессов, влияющих на коэффициент усиления и температурный режим на модельном устройстве (Рис.3) при давлениях смеси $2 \div 10$ Тор. Расчеты проводились при содержаниях $O_2(^1\Delta)$, близких к рекордным значениям, полученным с использованием ЭР ГСК на базе высокочастотного разряда в работах [12, 13].

При проведении расчётов варьировалась концентрация атомов $O(^3P)$, концентрация и степень диссоциации молекулярного йода и пр. Параметры инжекции: радиус - R_{inj} , температура - T_{inj} задавались равными 0.25 см и 240К соответственно, а эффективная скорость потока - $v_f=100$ м/с.

В этом разделе проведем анализ основных кинетических процессов при следующих выбранных параметрах $P=5$ Тор, $T_{ox}=340$ К, $Y=20\%$, $\chi(O)=5\%$, $\eta(I_2)=1\%$.

На Рис. 5 представлены результаты расчета коэффициента усиления и температуры смеси при этих условиях на оси зоны смешения.

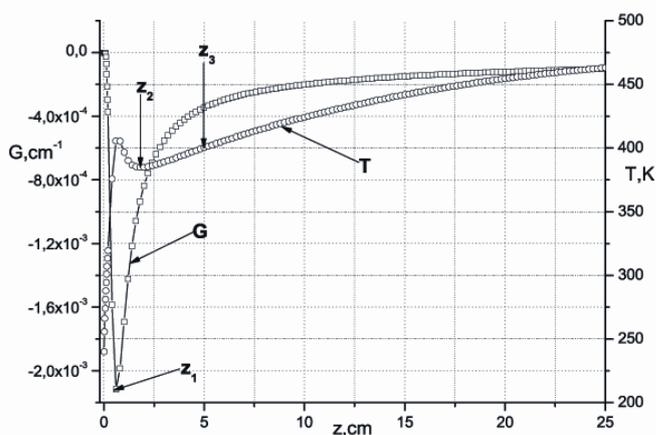
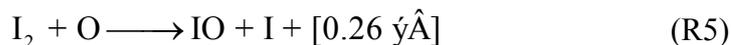


Рис.5. Распределение G и температуры смеси (на оси) по длине зоны смешения. $P=5$ Тор, $T_{ox}=340$ К, $Y=20\%$, $\chi(O)=5\%$, $\eta(I_2)=1\%$.

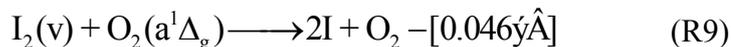
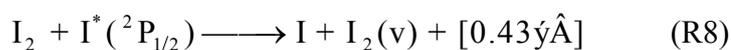
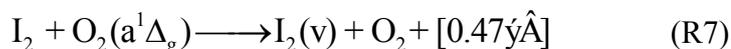
Из Рис.5 видно, что профили коэффициента усиления и температуры смеси вдоль оси z имеют явно выраженный немонотонный характер. Можно заметить, что минимум поглощения и пик температуры при $z=z_1$ коррелируют между собой. При $z=z_2$ имеется локальный минимум профиля температуры, а при $z>z_2$ наблюдается плавное нарастание температуры и падение $G(z)$.

Результаты расчётов показывают, что на расстояниях $z \leq z_1$ формирование профилей

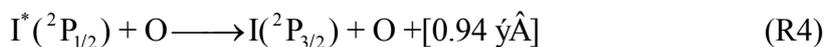
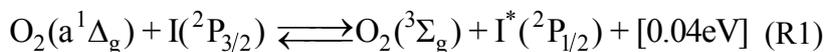
температуры смеси - $T(z)$ и коэффициента усиления - $G(z)$ полностью определяется диффузией атомов $O(^3P)$ в поток $I_2:He$ и разложением молекулярного йода в быстрых цепных реакциях R5, R6:



Энерговыделение за один цикл в этих реакциях составляет ≈ 3.58 эВ. В результате, происходит формирование локального максимума температуры (при $z=z_1$) за счет конкуренции энерговыделения в (R5, R6) и теплоотвода с оси z . Быстрая наработка атомарного йода в реакциях (R5, R6) приводит к тому, что коэффициент усиления резко падает и достигает минимума в точке ($z=z_1$), где молекулярный йод практически полностью диссоциирует (Рис.5). Дополнительно разложение I_2 идет в реакциях:



в которых выделяется ~ 0.85 эВ энергии, идущей на разогрев смеси. Коэффициент диффузии молекул СК в смесь $I_2:He$ в ~ 1.5 раза меньше, чем атомов O . Поэтому влияние СК на формирование профилей $T(z)$ и $G(z)$ происходит ниже по потоку ($z>z_1$). Энерговыделение при $z>z_2$ связано с реакциями (R1) и (R4):



Температура в этой области плавно нарастает (Рис.5). Коэффициент усиления растет за счет передачи возбуждения от СК к $I(^2P_{3/2})$ в реакции (R1). Однако, всюду по оси z $G(z)<0$. Это объясняется монотонным ростом температуры смеси в области $z>z_3$. Действительно, из соотношения (1) и баланса прямой и обратной реакций R1 нетрудно получить соотношение, определяющее степень возбуждения атомарного йода $[I^*]/[I] \equiv [I^*(^2P_{1/2})]/[I(^2P_{3/2})]$:

$$\frac{[I^*(^2P_{1/2})]}{[I(^2P_{3/2})]} \cong 0.75 \times \frac{Y}{1-Y} \times \exp(401.4/T) \quad (7)$$

Из (7) следует, что $[I^*]/[I]$ определяется только степенью возбуждения кислорода Y и температурой газа. С ростом температуры и тушения СК величина $[I^*]/[I]$ падает. С повышением давления смеси $P \geq 5$ Тор растёт роль процесса тушения $O_2(^1\Delta_g)$ атомарным кислородом в трёхтельной реакции (R3), которая приводит к снижению содержания синглетного кислорода - Y . И, следовательно, к дополнительному снижению G . Необходимо также отметить, что дефект энергии в реакции (R3) - 0.98 эВ, поэтому при давлениях смеси $P \geq 5$ Тор и большом содержании $\chi(O)$ в потоке кислорода, энерговыделение в этой реакции приводит к существ-

венному росту температуры газа.

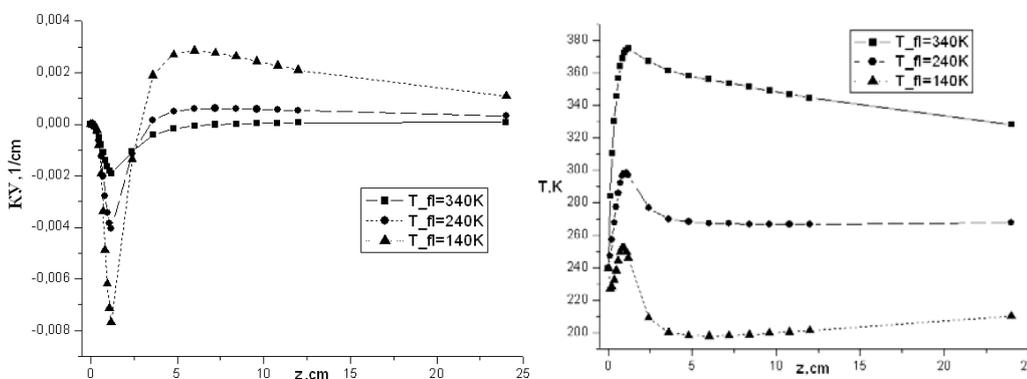
Из проведённых модельных расчетов следует, что профили коэффициента усиления и температуры газа по оси z , а также точки (z_1, z_2, z_3) (Рис.5) являются характерными для давлений смеси $P \approx 2 \div 10$ Тор. Температурный режим, который определяется в основном реакциями (R3 – R6), является основным фактором, влияющим на инвертирование перехода атома йода.

Проведенный анализ показал, что при использовании ЭРГСК, для которых выход СК (Y) принципиально ограничен на уровне $\approx 25\%$, требуется найти способы снижения результирующей температуры смеси. Этого эффекта можно достигнуть с помощью снижения входной температуры возбужденного потока кислорода; снижения интенсивности реакций разложения молекулярного йода, например, путем предварительной его диссоциации; снижения содержания атомов $O(^3P)$ в потоке кислорода. Эти возможности будут проанализированы с помощью разработанной модели в следующих разделах.

5. Вариация степени охлаждения кислородного потока и предварительной диссоциации I_2

В работе [15] проведено исследование влияния температурного режима смеси на коэффициент усиления при давлениях кислорода менее 2 Тор. Было показано, что снижение температуры потока возбужденного кислорода T_{ox} до смешения его с йодсодержащим потоком приводит к увеличению коэффициента усиления. В этом разделе представлены результаты, полученные с помощью разработанной модели, демонстрирующие изменение коэффициента усиления и результирующей температуры смеси при вариации температуры потока кислорода на входе в зону смешения (Рис.6).

Рис.6. Распределение G (КУ) и температуры смеси по длине зоны смешения (на оси) в зависимости от температуры T_{ox} . $P=2$ Тор, $O_2(^1\Delta_g) = 20\%$, $\chi(O)=0.2\%$, $\eta(I_2)=1\%$.



Из Рис.6 видно, что снижение температуры потока кислорода на входе в зону смешения приводит к существенному росту коэффициента усиления смеси. Например,

при температуре потока кислорода $T_{ox}=140K$ максимальное значение $G(r=0) = 0.003 \text{ см}^{-1}$. Однако, снижение температуры кислородного потока до значений $\sim T_{ox}=140K$ возможно только при сверхзвуковом расширении [10]. В данной работе рассматриваются дозвуковые

течения, поэтому расчеты при $T \approx 140\text{K}$ носят иллюстративный характер. В системах с дозвуковым смешением более реальным представляется понижение температуры до 240 К. Такую входную температуру можно получить, например, в системе с жидкостным охлаждением стенок [8].

Как следует из анализа кинетических процессов, основной вклад в рост температуры смеси вносит энерговыделение в процессах диссоциации молекулярного йода в реакциях (R4-R6) даже при содержании атомарного кислорода $\chi(\text{O})=0.2\%$. Это объясняет наблюдаемую динамику изменения вдоль оси z результирующей температуры $T(z)$ смеси и коэффициента усиления $G(z)$.

Одним из возможных путей снижения влияния этих процессов на $T(z)$ является предварительная диссоциация молекулярного йода вне смешения с возбуждённым потоком кислорода [20], и инжекция йодсодержащего потока с существенным содержанием (концентрацией) атомов I. Предварительная диссоциация I_2 может осуществляться разными способами, например, в дополнительном электрическом разряде.

В данной работе параметрически исследовано влияние степени предварительной диссоциации йода $D(\text{I}_2)$ на температурный режим смеси. Моделирование влияния степени предварительной диссоциации йода - $D(\text{I}_2)$ на формирование инверсии и температурный режим проводилось при давлениях смеси $P=2-5 \text{ Тор}$.

На Рис.7 приведены результаты расчетов температуры смеси при следующих параметрах смешиваемых потоков: $\chi(\text{O})=1\%$, $Y=20\%$, $\eta(\text{I}_2)=1\%$, $T_{\text{ox}}=240\text{K}$. Степень предварительной диссоциации I_2 варьировалась в пределах - $D(\text{I}_2)=0\%$, 50% и 100%.

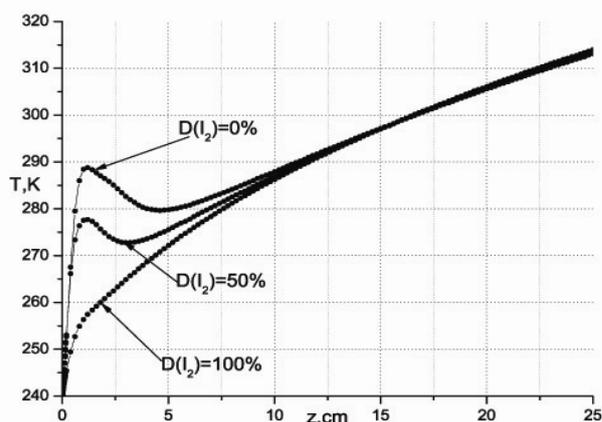


Рис.7. Распределение температуры смеси (на оси) по длине зоны смешения в зависимости от $D(\text{I}_2)=0, 50, 100\%$. $P=5 \text{ Тор}$, $\chi(\text{O})=1\%$, $T_{\text{ox}}=240 \text{ K}$, $Y=20\%$, $\eta(\text{I}_2)=1\%$.

На Рис.7 видно изменение характера профиля $T(z)$ при вариации степени предварительной диссоциации. При повышении степени диссоциации молекулярного йода роль реакций диссоциации I_2 (R4-R6) в энергобалансе результирующей смеси снижается. На Рис.7. видно исчезновение локального максимума температуры с ростом степени диссоциации молекуляр-

ного йода. В этом случае основным процессом нагрева смеси является процесс тушения атомов I^* в реакции с участием $O(^3P)$ – (R4) для давлений смеси $P < 5$ Тор. С ростом давления $P > 5$ Тор растет вклад в нагрев смеси процессов тушения атомарным кислородом молекул $O_2(^1\Delta_g)$ в реакции (R3).

В следующем разделе мы проанализируем влияние на инвертирование лазерного перехода вариации содержания атомарного кислорода. Как уже упоминалось в разделе 2, возможность связывания атомарного кислорода исследовалась в работах [8,11-13].

6. Вариация содержания атомарного кислорода

Для детального понимания того, как содержание атомарного кислорода влияет на температурный режим и усилительные свойства смеси, в этом разделе проведено моделирование перемешивания потоков йода и кислорода с вариацией мольной доли атомов O.

На Рис.8 (a, b) и Рис.9 (a,b) представлены результаты численных расчётов параметров смеси при содержании атомов кислорода $\chi(O)=0.1\%$, 1% и 10% . Расчёт с содержанием атомов O = 10% проведён для иллюстрации влияния больших $\chi(O)$ на коэффициент усиления и температуру смеси. Моделирование проводилось при следующих условиях: давление кислорода $P=5$ Тор, $T_{ox}=340$ К содержание СК – $Y=20\%$, мольная доля I_2 в потоке $I_2:He$ составляла 1% , а степень диссоциации молекулярного йода - $D(I_2)=50\%$. Как было показано ранее, основным каналом диссоциации йода является цикл с образованием промежуточной молекулы IO в реакциях (R1, R2), а дополнительно разложение I_2 происходит в (R3-R5). Поэтому, с одной стороны, присутствие атомов O в смеси снижает расход молекул синглетного кислорода на диссоциацию I_2 . Однако с другой стороны, реакции тушения I^* и $O_2(^1\Delta_g)$ с участием $O(^3P)$ - (R6, R8) - существенным образом влияют на разогрев смеси, особенно при давлениях смеси $P \geq 5$ Тор. Например, при моделировании в условиях Рис.8. концентрация атомарного кислорода в зоне смешения даже в минимальных $\chi(O) \approx 1\%$ количествах (Рис. 8(b)) приводит к росту температуры смеси за счет энерговыделения в реакции (R6) при тушении I^* атомами O (Рис.8 (b)). Как видно из Рис.8 (a), это приводит к тому, что уже при содержании $\chi(O) \approx 1\%$, пороговое значение инверсии не достигается - $[I^*]/[I] \approx 0.46$. При этом по всей длине зоны смешения $G(\chi(O) = 1\%) \cong 0$

(Рис.9 (b)).

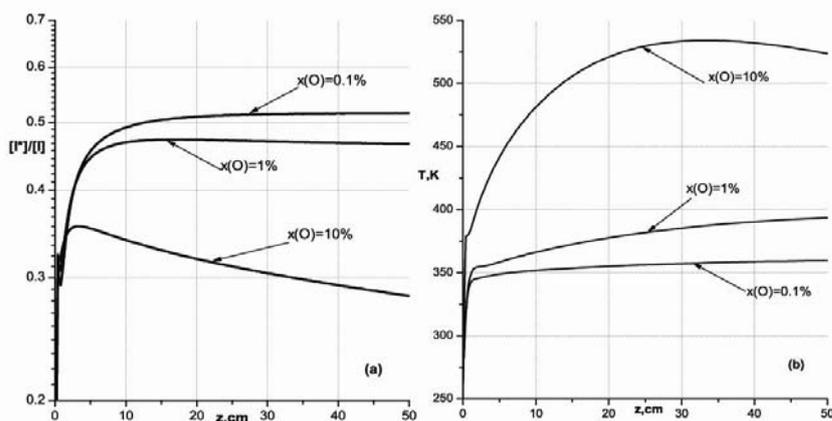


Рис.8. Распределение $[I^*]/[I]$ - (а) и температуры газа - (b) (на оси) по длине зоны смешения в зависимости от содержания $\chi(O)=0.1, 1, 10\%$ в смеси. $P=5$ Тор, $T_{ox}=340$ К, $\eta(I_2)=1\%$, $Y=20\%$.

При доле атомов $\chi(O)=0.1\%$ эффективность процесса тушения I^* в реакции (R4) существенно снижена, и температура газа слабо меняется по всей длине зоны смешения (Рис.8(b)). При этом отношение $[I^*]/[I] \approx 0.52$ (Рис.8(a)), т.е. инверсия на лазерном переходе достигается.

При содержании $\chi(O) \leq 1\%$ реакция (R3) практически не влияет на концентрацию молекул $O_2(a^1\Delta_g)$ в смеси, что видно из Рис.9(a). Однако, при содержании $\chi(O) \geq 5\%$ в смеси на концентрацию синглетного кислорода в смеси заметно влияет тушение $O_2(a^1\Delta_g)$ атомами O в трёхтельной реакции (R3) (Рис.9(a)). Этот процесс приводит к снижению Y по длине зоны смешения. Например, при $\chi(O)=10\%$ концентрация СК в смеси от первоначальной составляет $[O_2(a^1\Delta_g)]/[O_2(a^1\Delta_g)]_0 \approx 0.8$ (Рис.9 (a)), т.е. при этом $Y \approx 16\%$.

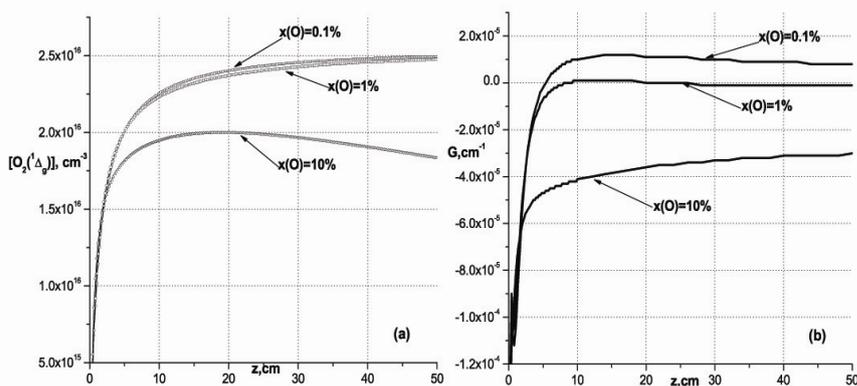


Рис.9. Распределение концентрации $O_2(a^1\Delta_g)$ (на оси) - (а) и усреднённого по диаметру трубки G - (b) по длине зоны смешения в зависимости от содержания $\chi(O)=0.1, 1, 10\%$ в смеси. $P=5$ Тор, $T_{ox}=340$ К, $\eta(I_2)=1\%$, $Y=20\%$.

При $\chi(O)=10\%$ выделение тепла в реакциях (R5, R6) приводит к сильному разогреву газа. Одновременный рост температуры смеси и снижение содержания СК - Y , как следует из (7), приводит к уменьшению $[I^*]/[I]$, поэтому на Рис.8(a) виден плавный спад $[I^*]/[I]$, так что при $z=30$ см $[I^*]/[I] \approx 0.3$. По всей длине трубки $G(\chi(O)=10\%) < 0$ (Рис.9 (b)).

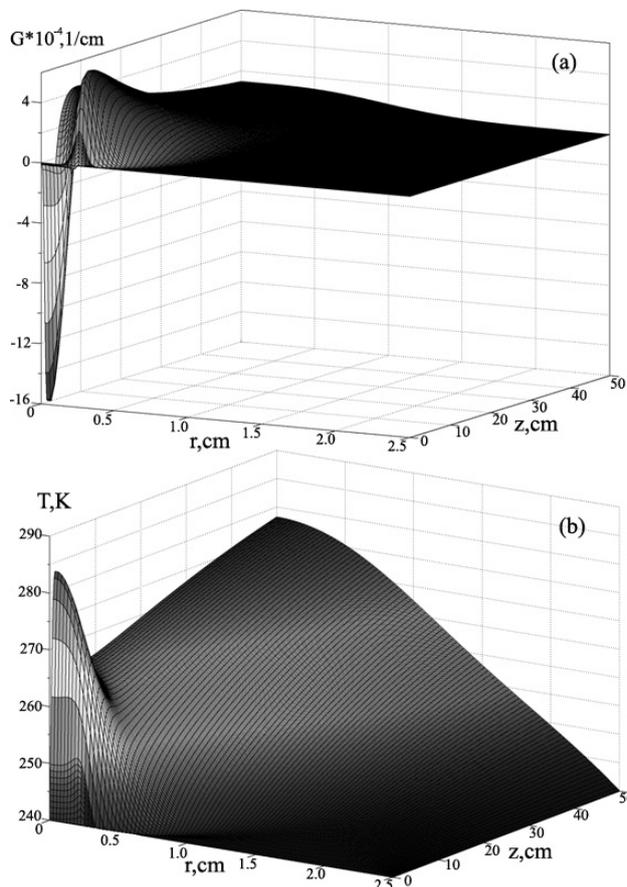


Рис.10. Распределение G - (а) и температуры смеси - (b) по длине и радиусу зоны смешения. $P=5 \text{ Тор}$, $T_{\text{ox}}=240\text{K}$, $Y=20\%$, $\chi(\text{O})=0.1\%$, $\eta(\text{I}_2)=1\%$

Проведённый анализ влияния вариации доли атомов O в кислородном потоке на усилительные свойства смеси показывает, снижение концентрации атомарного кислорода является одним из основных условий формирования инверсии на переходе атома йода. Содержание атомов O менее 1% при условиях $P=5 \text{ Тор}$, $T_{\text{ox}}=340\text{K}$, $Y=20\%$, $\eta(\text{I}_2)=1\%$, $D(\text{I}_2)=50\%$, и является допустимым для получения $G>0$.

Необходимо отметить, существенный факт. На Рис.9 (b) для случая $\chi(\text{O})=1\%$ в области $10 \leq z \leq 20 \text{ см}$ видно, что усреднённый по диаметру трубки коэффициент G мал, но всё же имеет положительное значение, однако, на Рис.9 (a) отношение $[\text{I}^*]/[\text{I}]$, рассчитанное на оси трубки в этой же области, явно не достигает значения, необходимого для возникновения инверсии. Это означает, что профиль коэффициента усиления распределён по радиусу неоднородно, особенно это характерно для давлений смеси $P \geq 5 \text{ Тор}$. Например, повышение давления с 2 до 5 Тор приводит к тому, что при заданной доле $\chi(\text{O})$ в смеси время протекания химических процессов: диссоциации I_2 в реакциях (R5,R6), накачки верхнего возбуждённого уровня атома йода - $^2\text{P}_{1/2}$ в реакции (R1), тушения $\text{I}^*(^2\text{P}_{1/2})$ и $\text{O}_2(\text{a}^1\Delta_g)$ в (R4,R3) уменьшается. Но в то же время при повышении давления длины теплопроводности и диффузии вдоль радиальной оси возрастают \sim в 2.5 раза. За счёт разницы времён протекания этих физико-химических процессов появляется неоднородность распределения коэффициента G по радиусу зоны смешения. Пояснить сказанное помогает Рис.10.

На этом рисунке представлены результаты расчёта распределения коэффициента усиления и температуры смеси по длине и радиусу зоны смешения при условиях: $P=5\text{Тор}$, $\eta(I_2)=1\%$, $T_{\text{ок}}=240\text{К}$, $Y=20\%$ и содержании $\chi(O)=0.1\%$. Рис.10 (а) демонстрирует сильно неоднородную структуру распределения G по радиусу. Подробнее рассмотрим физику происходящего. После инъекции потока $I_2:\text{He}$ в кислород и выравнивания давлений, радиальные потоки диффузии компонент смеси приводят к перемешиванию газа. Коэффициенты диффузии молекул I_2 в кислородную смесь примерно в 3-4 раза меньше, чем коэффициенты диффузии компонент потока кислорода в поток $I_2:\text{He}$. Исходя из этого, можно говорить об однонаправленной диффузии кислорода в йодсодержащий поток. Как уже было сказано, коэффициент диффузии атомов O в смесь $I_2:\text{He}$ в ~ 1.5 раза больше, чем молекул СК, поэтому в смеси идёт быстрая диссоциация молекулярного йода с образованием атомов I в реакциях (R1, R2). Этот процесс можно проследить на Рис.10 (b), так как он сопровождается сильным энерговыделением, то на Рис.10.(b) виден сильный рост температуры смеси в области $r \leq R_{\text{inj}}$. Кроме того, из Рис.10.(b) можно отметить, что фронт нарастания температуры идёт именно от границы смешиваемых потоков. Диффузия $O_2(^1\Delta_g)$ в смесь, содержащую атомарный йод, приводит к быстрому образованию возбуждённых атомов I^* в реакции (R7), причём отношение времени накачки I^* ко времени диффузии $O_2(^1\Delta_g)$ в йод составляет $\approx 10^{-3}$.

Из Рис.10 (а) видно, что профиль коэффициента G имеет минимум на оси зоны смешения, а резкий максимум G сдвинут относительно аксиальной оси к границе потоков $r=R_{\text{inj}}$. На расстояниях $z \approx 10$ см поток диффузии молекул СК к оси трубки снижается, это видно из Рис.9.(а), и профиль коэффициента усиления на оси $G(r=0,z)$ достигает максимума (Рис.10 (а)). Градиент температуры от оси до границы смешиваемых потоков составляет примерно 80 К (при условиях расчёта Рис.10 температура кислородного потока составляет $T_{\text{ок}}=240$ К), но из-за высокой теплопроводности гелия (поток $I_2:\text{He}$ всего на 1% состоит из молекул йода) уже на расстояниях $z \approx 10$ см температура йодсодержащего потока снижается (Рис.10 (b)). Затем диффузионное расплывание атомов I и I^* приводит к более пологому профилю коэффициента усиления вдоль транспортной координаты z ($z \approx 30\text{см}$). Температура смеси растёт за счёт выделения тепла при тушении I^* в реакции (R6). На расстояниях $z \approx 30$ см теплоотвод с оси трубки на стенку замедлен, т.к. перемешанный поток состоит в основном из кислорода, который обладает сравнительно невысокой теплопроводностью. Поэтому рост температуры приводит к снижению G на расстояниях более 40 см.

Проведённое детальное рассмотрение процесса перемешивания потоков йода и кислорода позволяет заключить, что расчёт коэффициента усиления, усреднённого по диаметру зоны смешения, физически более обоснован, особенно при повышенных давлениях смеси $P \geq 5$ Тор (Рис.9 (b)).

7. Оптимизация содержания I_2 в зоне смешения.

Как было отмечено, температурный режим смеси сильно зависит от выделения тепла за счёт диссоциации молекулярного йода в реакциях (R4-R9). Поэтому энерговыделение при разложении йода, напрямую зависит от концентрации молекул I_2 в потоке I_2 :He.

В этом разделе проведены серии расчётов параметров смеси при варьировании концентрации молекулярного йода в потоке I_2 :He. Смешение моделировалось при давлениях смеси $P = 2 \div 10$ Тор и содержании атомов кислорода в возбуждённом потоке - $\chi(O)=0.1, 1\%$. Температура кислородного потока полагалась равной - $T_{ox}=240$ К. На Рис.11 приведены зависимости $[I^*]/[I]$ от начальной концентрации молекулярного йода в потоке I_2 :He - $[I_2]_0$, рассчитанные на оси трубки. Из Рис.11 видно, что с увеличением концентрации $[I_2]_0$ в йодсодержащем потоке отношение $[I^*]/[I]$ в смеси падает, например, при давлении $P=5$ Тор, $\chi(O)=1\%$ и $[I_2]_0=10^{16}$ см⁻³ - $[I^*]/[I] \approx 0.28$, что почти в 2 раза ниже порога инверсии. Понижение $[I_2]_0$ приводит к росту $[I^*]/[I]$ – при $P=10$ Тор, $\chi(O)=0.1\%$ и $[I_2]_0=4 \cdot 10^{14}$ см⁻³ - $[I^*]/[I] \approx 0.7$ (Рис.11). Снижение концентрации $[I_2]_0$ вплоть до $\sim 10^{14}$ см⁻³ ведёт к насыщению отношения $[I^*]/[I]$ (Рис. 11) и, следовательно, насыщению инверсии.

Проведённые расчёты свидетельствуют, что с одной стороны большое содержание $I_2 \sim 10^{16}$ приводит к сильному выделению тепла при разложении I_2 . Это ведёт к росту температуры смеси и, следовательно, снижению инверсии на лазерном переходе при заданном Y , что и видно из Рис.11.

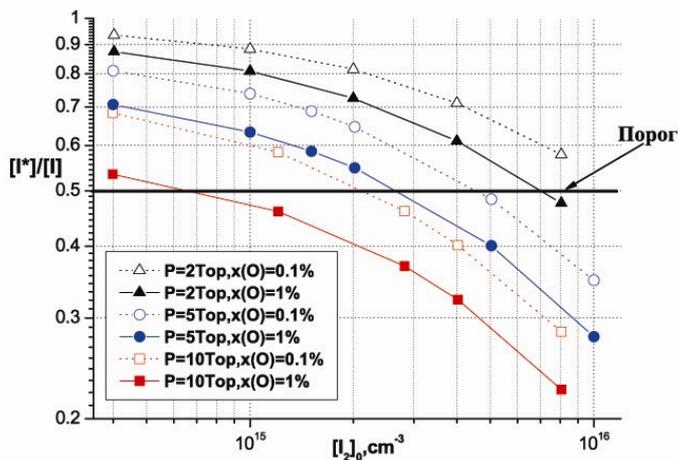


Рис.11. Зависимость $[I^*]/[I]$ от начальной концентрации $[I_2]_0$ в зоне смешения (на оси). $P=2, 5, 10$ Тор, $T_{ox}=240$ К, $\chi(O)=0.1, 1\%$, $\chi(O_2(^1\Delta_g))=20\%$.

В то же время при малых концентрациях $I_2 \sim 10^{14}$ в потоке I_2 :He снижается концентрация атомарного йода - $[I]$ в зоне смешения. Так как, коэффициент усиления пропорционален:

$$G_{34} \sim [I] \times \left(\frac{[I^*]}{[I]} - \frac{1}{2} \right),$$

то снижение концентрации I_2 ведёт к уменьшению коэффициента G . Из этого следует, что путём оптимизации содержания I_2 в смеси можно добиться увеличения

коэффициента усиления. Из Рис.11 видно, что при прочих равных условиях получить максимальный коэффициент усиления можно путем оптимизации содержания I_2 в смеси. Например, при давлении - $P=5$ Тор, содержании атомов кислорода - $\chi(O)=0.1\%$ - $\max\langle G \rangle_{2R} = 1.08 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ достигается при концентрации $[I_2]_0 \approx 2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$. В таблице ниже приведены значения максимального $G > 0$, рассчитанные на оси трубки, для условий Рис.11.

	$[I_2]_0, \text{ см}^{-3}$	$G, \text{ см}^{-1}$	
		$\chi(O)=0.1\%$	$\chi(O)=1\%$
P=5 Тор	$4.00 \cdot 10^{14}$	$2.45 \cdot 10^{-4}$	$1.81 \cdot 10^{-4}$
	$1.00 \cdot 10^{15}$	$3.70 \cdot 10^{-4}$	$2.67 \cdot 10^{-4}$
	$1.51 \cdot 10^{15}$	$4.32 \cdot 10^{-4}$	$2.58 \cdot 10^{-4}$
	$2.01 \cdot 10^{15}$	$4.35 \cdot 10^{-4}$	$1.89 \cdot 10^{-4}$
P=10 Тор	$4.03 \cdot 10^{14}$	$1.40 \cdot 10^{-4}$	$3.50 \cdot 10^{-5}$
	$1.21 \cdot 10^{15}$	$1.92 \cdot 10^{-4}$	-

Из Таблицы видно, что при прочих равных условиях получить максимальный коэффициент усиления можно путём оптимизации содержания I_2 в смеси. Например, при $P=5$ Тор, $T_{\text{ок}}=240$ К, $\chi(O)=1\%$ максимальный $G=2.67 \cdot 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ достигается при $[I_2]_0=10^{15} \text{ см}^{-3}$.

Таким образом, в данной работе проведен анализ кинетики формирования инверсии в атоме йода на квазидвумерной диффузионной модели с использованием модельного устройства, которое удобно для экспериментального исследования. Модель позволяет получать прогностические оценки влияния вариации параметров смеси на температурный режим и усилительные свойства среды. Проведенный параметрический анализ влияния основных кинетических процессов на формирование инверсной населенности на лазерном переходе атомов йода при повышенных давлениях смеси $P=5-10$ Тор показывает, что снижение содержания O в смеси и увеличение степени предварительной диссоциации I_2 приводит к увеличению инверсии за счёт снижения энерговыделения при разложении I_2 . При этом основными процессами нагревания смеси являются тушение I^* и $O_2(^1\Delta)$ в реакциях (R3, R42). Оптимизация концентрации I_2 в смеси ведёт к существенному увеличению инверсии. При $P=5-10$ Тор, $T_{\text{ок}}=240$ К, $\chi(O)=0.1-1\%$ концентрация $I_2 \approx 10^{15} \text{ см}^{-3}$ является оптимальной для получения усиления в системе. В дальнейшем будет построена полная газодинамическая модель смешения потоков. Это позволит проводить модельные исследования в более сложных системах инжекции с учётом реальных условий смешения при давлениях $P \geq 10$ Тор.

8. Заключение.

Проведен параметрический анализ основных кинетических механизмов формирования инверсии на лазерном переходе атома йода на основе квазидвумерной диффузионной модели. Расчёты проводились для устройства с осесимметричным впрыском смеси $I_2:He$ в возбуждённый в ЭРГСК поток кислорода. Разработанная модель позволила получить прогностические оценки влияния вариации параметров смеси на температурный режим и усилительные свойства среды.

Параметрическое исследование кинетики химических процессов при смешении потоков показало, что температурный режим является основным фактором, влияющим на инвертирование перехода в атоме йода. Определены основные процессы, приводящие к разогреву системы - разложение молекулярного йода и тушение возбуждённых компонент смеси I^* и $O_2(a^1\Delta_g)$ атомарным кислородом.

Анализ влияния вариации доли атомов O в кислородном потоке на усилительные свойства смеси в диапазоне давлений смеси $P=2-10$ Тор показал, что снижение концентрации атомарного кислорода является одним из основных условий формирования инверсии на переходе атома йода. Снижение содержания O в потоке кислорода приводит к увеличению инверсии за счёт снижения энерговыделения при разложении I_2 и нагревания смеси за счёт тушения I^* и $O_2(a^1\Delta_g)$ в реакциях с участием O . Отмечено, что рост давления в возбужденном потоке кислорода приводит при таком способе смешения к появлению неоднородного распределения коэффициента усиления по радиусу на всей длине зоны смешения.

Проведён анализ влияния вариации содержания молекулярного йода при смешении потоков на температуру и коэффициент усиления. Показано, что при прочих равных условиях (давление, содержание O и др.) можно получить максимальный коэффициент усиления путем оптимизации содержания I_2 в смеси.

Продемонстрировано влияние степени предварительной диссоциации йода $D(I_2)$ на температурный режим смеси. Показано, что увеличение степени предварительной диссоциации I_2 вне зоны смешения позволяет снизить нагрев смеси газа, тем самым добиться увеличения коэффициента усиления.

Результаты данной работы будут использованы в дальнейшем для построения более общей модели КИЛ с ЭР ГСК, учитывающей одновременно химическую кинетику, газодинамику химически реагирующего газа и поле лазерного излучения. С помощью неё будет продолжено изучение кинетики и нахождение оптимальных режимов работы КИЛ с ЭР ГСК.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ-№06-02-16537 и Гранта НШ-133.2008.2.

Литература.

- [1] W. E. McDermott, N. R. Pchelkin, D. J. Benard, and R. R. Bousek, //An electronic transition chemical laser. 1978 Appl. Phys. Lett. Vol 32(8) pp. 469-470.
- [2] Юрьшев Н.Н.,// «Кислородно-йодный лазер с химической накачкой», Квантовая электроника, 1996. 23, № 7. С. 583-600.
- [3] Carroll D.L., Solomon W.C.,//Proceedings of the XIII International Symposium on Gas and Chemical Lasers and High Power Laser Conference, Florence, Italy, 18-22 Sept. 2000.
- [4] Fujii H.,// "COIL in Japan", AIAA Paper 94-2419, Colorado Springs, CO, June 1994.
- [5] Itami S., Nakamura Y., Nakamura Y. et. al.,// AHPLA '99, Osaka, Nov1999.
- [6] Vasiljeva A.N., Guljaev K.S., Kovalev A.S., Lopaev D.V.,// Teplofizika Vysokih Temperatur (Russian), 1991, 29 (1), 56.
- [7] Kovalev A.S., Klopovskiy K.S., Lopaev D.V., et al.,// ESCAMPIG 16th – ICRP 5th, Conference Proceedings, 2002, 1, 41.
- [8] Carroll D.L., Verdeyen J.T., King D.M. et al.,// IEEE Journal of Quantum Electronics, 2005. 41, N 2. P. 213-223.
- [9] Hicks A., Utkin Yu.G., Lempert W.R., Rich J.W., and Adamovich I.V.,//Appl. Phys. Lett. 89, 241131, 2006
- [10] Hicks A., Adamovich I.V., et al.,// J. Phys. D: Appl. Phys., 2007.40 P. 1408-1415.
- [11] Rakhimova T.V., Kovalev A.S., Klopovsky K.S. et al.,// 36th AIAA Plasmadynamics and Lasers Conference, Toronto, 6-9 June 2005.
- [12] Rakhimova T.V. et al.,// 37th AIAA Plasmadynamics and Lasers Conference, San Francisco, 5-8 June 2006.
- [13] Braginsky O.V., Kovalev A.S., Lopaev D.V. et al.,// J. Phys. D: Appl. Phys., 2006. 39, P. 5183-5190.
- [14] Proshina O.V., Rakhimova T.V., Braginsky O.V. et al.,// J. Phys. D: Appl. Phys., 2006. 39, P. 5191-5200.
- [15] Carroll D.L., Solomon W.C.,//Proceedings of the XIII International Symposium on Gas and Chemical Lasers and High Power Laser Conference, Florence, Italy, 18-22 Sept. 2000,. Vol. 4184, pp. 40-44.
- [16] Perin J., Leroy O., Bordage M.C.,// 1996, Contrib. Plasma Phys. 36, 3.
- [17] Kushner M., H2D2XS Database, <http://uigelz.ece.iastate.edu>
- [18] L. A. Schlie. Anomalous dispersion effects in low-pressure atomic-iodine lasers at 1.315 μm . J. Opt. Soc. Am. Vol.71, no. 9 Sept.1981.
- [19] Sentman L.H., Subbiah M., Zelazny S.W.,// "Blaze II: A Chemical Laser Simulation Computer Program", Bell Aerospace Textron, Buffalo, NY, T.R. H-CR-77-8, Feb. 1977.
- [20] Михеев П.А., Шепеленко А.А., Воронов А.И., Купряев Н.В. // «Квантовая электроника», 32, №1, 2002, С.1-4.

Приложение.

Таблица 1. Система химических реакций модели.

Константа скорости бинарной реакции ($\text{см}^3/\text{с}$), трехтельной – ($\text{см}^6/\text{с}$).

№	Реагенты					→	Продукты					Константа реакции, $\text{см}^3/\text{с}$	Ссылка
1	O2(b)	+	He			→	O2(a)	+	He			1.0e-17	[15]
2	O2(b)	+	O2(S)			→	O2(a)	+	O2(S)			3.9e-17	[15]
3	O2(a)	+	O2(S)			→	O2(S)	+	O2(S)			1.6e-18	[15]
4	I2	+	O2(b)			→	2I	+	O2(S)			4.0e-12	[15]
5	I2	+	O2(b)			→	I2	+	O2(S)			1.6e-11	[15]
6	I2	+	O2(a)			→	I2*	+	O2(S)			7.0e-15	[15]
7	I2	+	I*			→	I	+	I2*			3.5e-11	[15]
8	I2*	+	O2(a)			→	2I	+	O2(S)			3.0e-10	[15]
9	I2*	+	O2(S)			→	I2	+	O2(S)			4.9e-12	[15]
10	I2*	+	He			→	I2	+	He			9.8e-12	[15]
11	I	+	O2(a)			→	I*	+	O2(S)			7.8e-11	[15]
12	I*	+	O2(S)			→	I	+	O2(a)			1.04e-10* exp(-401.4/T)	[15]
13	I	+	O2(a)			→	I	+	O2(S)			1.0e-15	[15]
14	I*	+	O2(S)			→	I	+	O2(S)			3.5e-16	[15]
15	I*	+	O2(a)			→	I	+	O2(b)			1.0e-13	[15]
16	I*	+	O2(a)			→	I	+	O2(a)			1.1e-13	[15]
17	I*	+	I			→	I	+	I			1.7e-13	[15]
18	I*	+	He			→	I	+	He			5.0e-18	[15]
19	I	+	I	+	I2	→	I2	+	I2			3.6e-30	[15]
20	I	+	I	+	He	→	I2	+	He			3.8e-33	[15]
21	I*	+	I	+	I2	→	I2(B)	+	I2			3.6e-30	[15]
22	I2(B)					→	I	+	I			1.0e+6	[15]
23	O	+	O	+	He	→	O2(S)	+	He			5.2e-35	[15]
24	O	+	O	+	O2(S)	→	O2(S)	+	O2(S)			5.2e-35	[15]
25	O	+	O	+	O2(a)	→	O2(S)	+	O2(a)			5.2e-35	[15]
26	O	+	O	+	O	→	O2(S)	+	O			5.2e-35	[15]
27	O	+	O2(S)	+	He	→	O3	+	He			6.0e-34* (T/300) ^{-2.8}	[15]
28	O	+	O2(S)	+	O2(S)	→	O3	+	O2(S)			6.0e-34* (T/300) ^{-2.8}	[15]
29	O	+	O2(S)	+	O2(a)	→	O3	+	O2(a)			6.0e-34* (T/300) ^{-2.8}	[15]
30	O	+	O2(S)	+	O	→	O3	+	O			6.0e-34* (T/300) ^{-2.8}	[15]
31	O2(b)	+	O			→	O2(a)	+	O			7.2e-14	[15]
32	O2(b)	+	O			→	O2(S)	+	O			0.8e-14	[15]
33	O	+	O3			→	O2(S)	+	O2(S)			8.0e-12* exp(-2060/T)	[15]
34	O2(a)	+	O3			→	O2(S)	+	O2(S)	+	O	5.2e-11* exp(-2840/T)	[15]
35	I2	+	O			→	IO	+	I			1.4e-10	[15]

№	Реагенты					→	Продукты				Кон- станта реакции. см ³ /с	Ссы- лка	
36	IO	+	O			→	I	+	O2(S)			3.0e-11	[15]
37	I*	+	O			→	I	+	O			3.5e-12	[8]
38	O	+	O2(a)	+	O2(S)	→	O	+	O2(S)	+	O2(S)	2.5e-32	[11]
39	O	+	O2(a)	+	He	→	O	+	O2(S)	+	He	6.3e-33	[15]
40	O2(b)	+	O3			→	O2(a)	+	O			3.30e-12	[15]
41	O2(a)	+	O			→	O2(S)	+	O			2.00e-16	[15]
42	O2(b)	+	O3			→	O2(S)	+	O2(S)	+	O	1.54e-11	[15]
43	O2(b)	+	O3			→	O2(S)	+	O3			3.30e-12	[15]
44	O2(a)	+	O2(a)			→	O2(b)	+	O2(S)			2.70e-17	[15]
45	O2(a)	+	O2(a)			→	O2(S)	+	O2(S)			1.70e-17	[15]
46	O2(a)	+	He			→	O2(S)	+	He			8.00e-21	[15]
47	I	+	O3			→	IO	+	O2(S)			2e-11* exp(-890/T)	[15]

Принятые в таблице обозначения: O₂(¹Δ_g) – O₂(a), O₂(¹Σ) – O₂(b), O₂(³Σ) – O₂(S), I(B³Π) – I₂(B), I₂(ν=45) – I₂*.

Елена Анатольевна Крылова
Александр Александрович Чукаловский
Татьяна Викторовна Рахимова
Константин Семенович Клоповский

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ
ИНВЕРСИИ НА ЛАЗЕРНОМ ПЕРЕХОДЕ АТОМА
ЙОДА В СМЕСИ МОЛЕКУЛЯРНОГО ЙОДА И КИСЛОРОДА,
ВОЗБУЖДЕННОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ РАЗРЯДОМ.

Препринт НИИЯФ МГУ – 2008 – 3/839