

и  $\text{CO}$ , что меняет кинетику колебательной релаксации в смеси. Наблюдаемое в интервале температур  $1750 \div 3000 \text{ K}$  уменьшение  $K_0$  может быть связано с увеличением скорости релаксации верхнего лазерного уровня молекулы  $\text{CO}_2$  при увеличении  $T_0$ , а также снижением концентрации углекислого газа в смеси и дезактивацией уровня (001) при столкновениях с молекулами воды и атомами водорода.

ИХФ АН СССР,  
Москва

Поступила в редакцию  
6/1 1976

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Н. Г. Басов, В. Г. Михайлов и др. ЖТФ, 1968, 38, 12, 2031.
2. В. К. Колюхов, А. М. Прохоров. Письма в ЖЭТФ, 1966, 3, 11, 436.
3. В. Н. Крошко, Р. И. Солоухин, Н. А. Фомин. ФГВ, 1974, 10, 4.
4. Г. В. Гембаржевский, Н. А. Генералов, Г. Н. Козлов. ПМТФ, 1973, 4, 18.
5. С. А. Лосев, В. Н. Макаров. Квантовая электроника, 1974, 1, 7, 1633.
6. R. L. Taylor, S. Bitterman. Rev. Mod. Phys., 1969, 41, 1.
7. W. A. Rosser, E. T. Gerry. J. Chem. Phys., 1971, 54, 4131.
8. I. Rom, J. Stricker. Acta Astronautica, 1974, 1, 1101.
9. В. Н. Кондратьев. Константы скоростей газофазных реакций. М., «Наука», 1970.
10. Н. Н. Кудрявцев, С. С. Новиков, И. Б. Светличный. ПМТФ, 1974, 5.
11. А. Б. Британ, С. А. Лосев, О. П. Шаталов. Квантовая электроника, 1974, 1, 12, 2620.
12. С. С. Пеннер. Количественная молекулярная спектроскопия и излучательная способность газов. М., ИЛ, 1963.
13. J. D. Anderson, E. Winkler. Proc. IEEE, 1971, 59, 4.
14. Р. И. Солоухин, Ю. А. Якоби. ПМТФ, 1974, 3.
15. В. В. Данилов, Э. П. Кругляков, Е. В. Шупько. ПМТФ, 1972, 6.

### ОБ ОПТИМИЗАЦИИ КОЭФФИЦИЕНТА УСИЛЕНИЯ В ГАЗОДИНАМИЧЕСКОМ ЛАЗЕРЕ НА УГЛЕКИСЛОМ ГАЗЕ

В. Н. Макаров

В данной работе приводятся результаты численного решения задачи оптимизации с целью получения максимальных значений коэффициента оптического усиления в смеси, содержащей молекулы  $\text{CO}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{He}$  и  $\text{H}_2\text{O}$ . Течение релаксирующего газа в сопле считалось одномерным, влияние вязкости газа не учитывалось. Для описания кинетики колебательного энергообмена использовалась схема, принятая в [1, 2]. Значения величин  $Q_{23}^{(i)}$ , входящие в выражение вероятности энергообмена между вторым и третьим типами колебаний молекулы углекислого газа  $Q_{23} = \xi_{\text{CO}_2} Q_{23}^{(3)} + \xi_{\text{N}_2} Q_{23}^{(4)} + \xi_{\text{He}} Q_{23}^{(5)} + \xi_{\text{H}_2\text{O}} Q_{23}^{(6)}$  ( $\xi$  — молярные доли компонент), согласно [3], можно представить в виде  $Q_{23}^{(i)} = \exp a_0^{(i)} x^3 + a_1^{(i)} x^2 + a_2^{(i)} x + a_3^{(i)}$ , а опираясь на исследования [4, 5] — в форме

$i$	$a_0^{(i)}$	$a_1^{(i)}$	$a_2^{(i)}$	$a_3^{(i)}$	$b_0^{(i)}$	$b_1^{(i)}$	$b_2^{(i)}$
$\text{CO}_2$	112200	-4760	593	-10,6944	178,33	-58,98	10,185
$\text{N}_2$	12700	-4580	508	-4,8844	378,33	-110,98	12,995
$\text{He}$	713	762	-265	-31,2156	184,7	-59,247	9,502

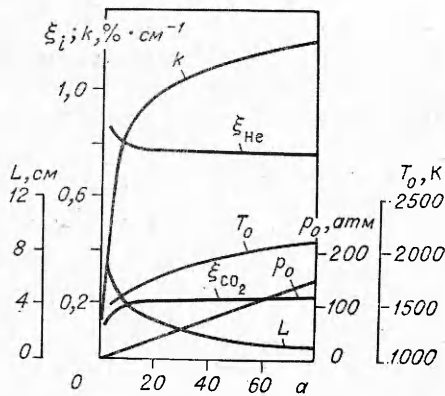


Рис. 1. Оптимальные значения параметров  $T_0$ ,  $\rho_0$ ,  $\xi_{CO_2}$ ,  $\xi_{He}$ ,  $L$  и максимального значения  $k$  в зависимости от величины  $a$ , смесь  $CO_2+He$  (здесь и на рис. 2, 3, 6 значения  $Q_{23}^{(i)}$  ( $i=CO_2, N_2, He$ ) взяты из работы [3]).

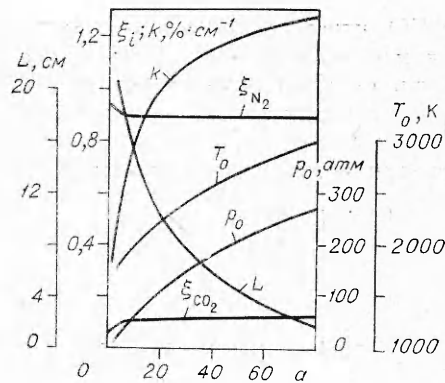


Рис. 2. Результаты решения задачи оптимизации для смеси  $CO_2+N_2$ .

$$Q_{23}^{(i)} = 10b_0^{(i)}x^2 + b_1^{(i)}x + b_2^{(i)}, \text{ где } x = T^{-1/3},$$

$T$  — поступательная температура газа. Входящие в выражения  $Q_{23}^{(i)}$  постоянные приведены в таблице. В данной работе предусматривалась возможность применения обеих аппроксимаций.

Рассмотрим класс сопел с линейным изменением отношения величины площади сечения сверхзвуковой части сопла  $A(x)$  к площади его критического сечения  $A_c$ , т. е.  $A(x)/A_c = 1+ax$  ( $x$  — расстояние от критического сечения). Оптимизация проводилась по начальным условиям и по параметрам  $a$  и  $L$  (см. [2]). Поиск осуществляется методом конфигураций, основы которого изложены в [6].

В работе [7] ставилась вариационная задача поиска максимума коэффициента усиления для смеси  $CO_2+N_2+He$  в узком диапазоне изменения параметров. Рассматривая эту работу, отметим, что для одновременного потока решение задачи о течении релаксирующего газа в сопле зависит только от  $A(x)/A_c$  (зависимость от  $A_c$  появляется только в двумерном приближении), так что одновременный поиск  $A(x)$  и  $A_c$  не является корректным. Очевидно, что в одномерном приближении нет смысла отдельно искать оптимум для осесимметричных и плоских сопел, поскольку в оптимальном режиме при этом, естественно, получается одно и то же решение.

На рис. 1—4, 6 приведены результаты решения задачи оптимизации для различных составов в зависимости от параметра  $a$ , характеризующего геометрию сопла (на всех графиках  $\xi_i$  выражено в молярных долях)<sup>1</sup>.

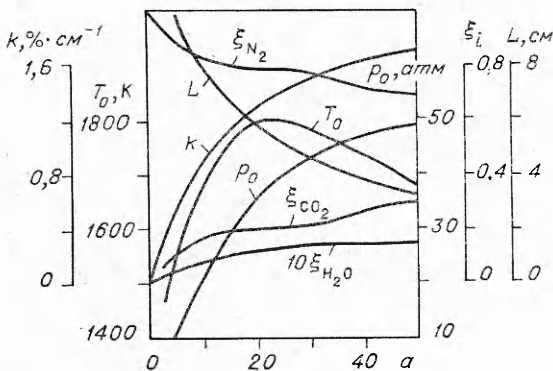


Рис. 3. Результаты решения задачи оптимизации для смеси  $CO_2+N_2+H_2O$ .

<sup>1</sup> Считалось, что величина столкновительной полуширины, входящая в выражение для коэффициента оптического усиления  $\Delta_c \sim 1/\sqrt{T}$ , а значение коэффициента Эйнштейна  $A_{mn} = 0,21$ , согласно [6]. Измерения [9] показали, что  $A_{mn}$  на 20% меньше, чем приня-

Из приведенных результатов видно, что при высоких значениях  $a$  необходимы высокие значения оптимальной температуры  $T_0$ . Это приводит к невыполнению условия отсутствия химических превращений. Действительно, при возрастании температуры прежде всего разлагаются молекулы  $\text{CO}_2$  (на рис. 5 сплошные кривые соответствуют равновесным значениям молярных долей молекул  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$  и  $\text{O}_2$ , образовавшимся в результате диссоциации при соответствующих оптимальных значениях  $T_0$  и  $p_0$  смеси  $\text{CO}_2 + \text{N}_2 + \text{He}$ ). Поэтому возникает вопрос, насколько заметно упадет величина  $k$  при уменьшении  $T_0$ . Представление об этом дают штрих-пунктирные кривые на рис. 4 и 6, соответствующие условиям, обеспечивающим получение  $k$  лишь на 5% меньше, чем оптимальное. Полученные результаты свидетельствуют о том, что рельеф многомерной поверхности вблизи оптимальной точки плавный (см. также результаты [2]), так что разница в температуре достигает 600 К.

Можно провести уточнение оптимального состава смеси с учетом химических превращений, имея в виду следующие обстоятельства: 1) расчеты [2] показывают, что в области максимума величина  $k$  более чувствительна к изменению  $\xi_{\text{CO}_2}$ , нежели к изменению  $\xi_{\text{N}_2}$ ; 2) из экспериментов [10] следует, что небольшая замена  $\text{N}_2$  (до 15%) на молекулы  $\text{CO}$  и  $\text{O}_2$  приводит к незначительному уменьшению величины коэффициента усиления, т. е. молекулы  $\text{N}_2$ ,  $\text{CO}$  и  $\text{O}_2$  в указанном диапазоне взаимозаменяемы. В соответствии с этим можно уточнить оптимальный состав, подбирая первоначальные концентрации до разложения (обозначим их через  $\xi_{\text{CO}_2}^0$  и  $\xi_{\text{N}_2}^0$ ) так, чтобы величины молярных долей после диссоциации (обозначим их через  $\xi_{\text{CO}_2}$ ,  $\xi_{\text{CO}}$ ,  $\xi_{\text{O}_2}$ ,  $\xi_{\text{O}}$ ) удовлетворяли условиям<sup>2</sup>:  $\xi_{\text{CO}_2} = \xi_{\text{CO}_2}^0$ ,  $\xi_{\text{N}_2} = \xi_{\text{N}_2}^0 + \xi_{\text{O}_2} + \xi_{\text{CO}}$  ( $\xi_{\text{O}} \sim 0$ ).

На рис. 7 приведены линии уровня функции  $m = m(r, T_0)$  при различных значениях параметра  $a$ , соответствующие решению более общей задачи получения  $\xi_{\text{CO}_2} = m(r, T_0) \xi_{\text{CO}_2}^0$ . При этом необходимо взять начальные значения концентраций  $\xi_{\text{CO}_2}^0$  и  $\xi_{\text{N}_2}^0$  в виде

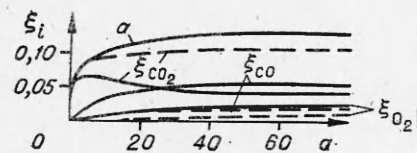


Рис. 5. Равновесные значения молярных долей молекул  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$  и  $\text{O}_2$ , образовавшихся в результате диссоциации.

— равновесные значения при оптимальной температуре  $T_0$  ( $a$  — значение  $\xi_{\text{CO}_2}^0$  из задачи оптимизации); — — — при температуре  $T_0$ .

тая здесь величина. Значение  $A_{mn}$  входит линейно в выражение для коэффициента усиления, поэтому уточнение  $A_{mn}$  не влияет на характер оптимизации, пропорционально меняя лишь абсолютные значения  $k$ .

При аппроксимации  $Q_{23}^{(6)}$  во всех вариантах использовались работы [4, 5].

<sup>2</sup> Как показывают расчеты [13], равновесные значения концентраций в таких лазерных смесях меняются незначительно и замораживаются в дозвуковой области сопла.

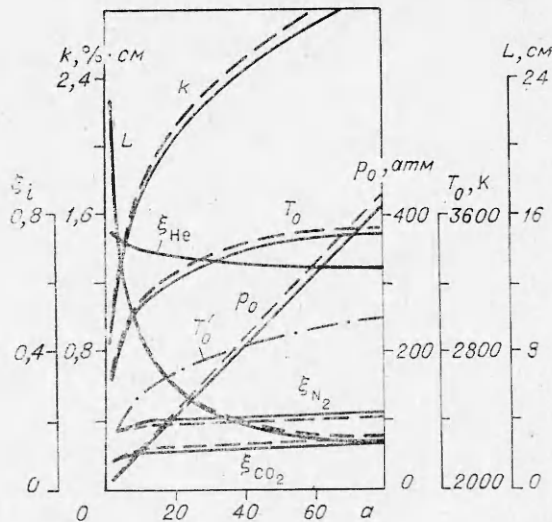


Рис. 4. Результаты решения задачи оптимизации для смеси  $\text{CO}_2 + \text{N}_2 + \text{H}_2\text{O}$ .

— — —  $Q_{23}^{(i)}$  [3]; — — — —  $Q_{23}^{(i)}$  [4]; — — — значения начальной температуры  $T_0$ , при которых  $k$  меньше оптимального на 5%.

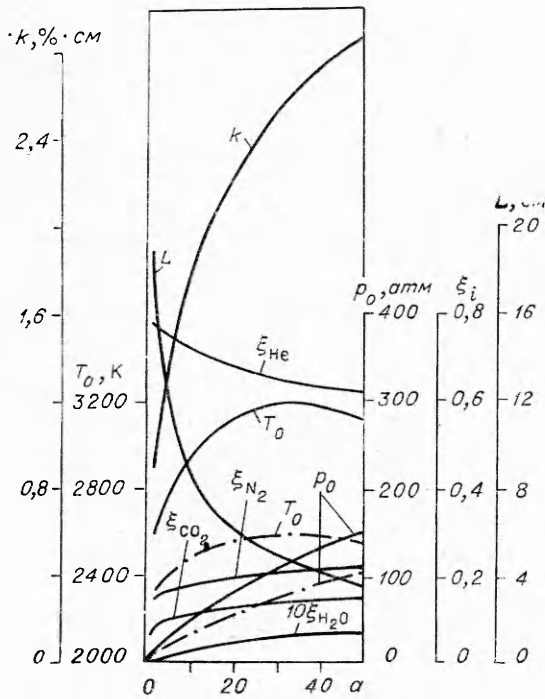


Рис. 6. Результаты решения задачи оптимизации для смеси  $\text{CO}_2 + \text{N}_2 + \text{He} + \text{H}_2\text{O}$ .  
 - - - вариации значений  $T_0$  и  $p_0$ , при которых  $k$  меньше оптимального на 5%.

$$\xi_{\text{CO}_2}^0 = \xi_{\text{CO}_2} + r \cdot \xi_{\text{N}_2},$$

$$\xi_{\text{N}_2}^0 = (1 - r) \xi_{\text{N}_2}.$$

Результаты рис. 7 соответствуют случаю, когда значения  $\xi_{\text{CO}_2}$  и  $\xi_{\text{N}_2}$  были взяты из решения задачи оптимизации состава  $\text{CO}_2 + \text{N}_2 + \text{He}$  (значение оптимального  $T_0$  велико прежде всего в этом случае). Кривая  $m(r, T_0) \equiv 1$  определяет те значения  $T_0$  и  $r$ , при которых после диссоциации первоначального состава остается столько молекул углекислого газа, что  $\xi_{\text{CO}_2} = \xi_{\text{CO}_2}^0$ .

В заключение укажем, что условие одномерности и безотрывности течения накладывает определенные ограничения при выборе конкретных сопел. Если, например, рассматривать клиновидные сопла, то  $a = 2 \text{tg } \theta / h_*$ , где  $\theta$  — полуугол раствора,  $h_*$  — высота критического сечения. Расчеты показывают, что течение близко к одномерному при  $\theta \leq \theta_1 \approx 15^\circ$  и безотрывное при  $\theta \leq \theta_2 \approx 30 \div 40^\circ$  [11, 12]. Эти граничные значения угла накладывают ограничения на  $h_*$  в виде  $h_* \leq \text{tg } \theta_i / a$  ( $i = 1, 2$ ).

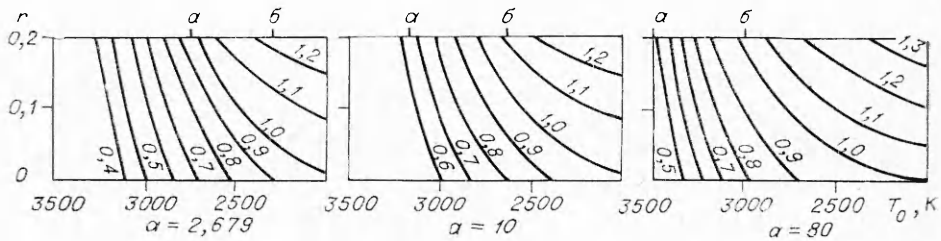


Рис. 7. Линии уровня функции  $m = m(r, T_0)$  при различных  $a$ .  
 а) оптимальные значения  $T_0$  при соответствующих значениях  $a$ ; б) значения  $T_0^1$ .

В свою очередь, вязкость газа также затрудняет использование и предельно малых  $h_*$  (порядка десятых долей миллиметра). Таким образом, реальные свойства течения газа устанавливают предел возможностей получения экстремальных величин коэффициента усиления.

Институт механики  
 МГУ

Поступила в редакцию  
 18/VI 1975

#### ЛИТЕРАТУРА

1. С. А. Лосев, В. Н. Макаров и др. ФГВ, 1973, 9, 4, 463.
2. С. А. Лосев, В. Н. Макаров. Квантовая электроника, 1974, 1, 7, 1633.
3. Р. И. Сериков. Канд. дис. МИФИ, 1973.

4. W. A. Rosser, E. T. Gerry. J. Chem. Phys., 1969, 51, 2286.
5. F. Heller, C. V. Moore. J. Chem. Phys., 1970, 52, 1005.
6. Д. Д. Уайлд. Методы поиска экстремума. М., «Наука», 1967.
7. В. Д. Жарков, Л. Ю. Лапушонко, Н. Н. Чебыкин. ПМТФ, 1974, 5, 3.
8. E. T. Gerry, D. A. Leopold. Appl. Phys. Letts., 1966, 8, 227.
9. В. В. Данилов, П. Кругляков, Е. В. Шунько. ПМТФ, 1972, 6, 24.
10. А. Б. Британ, С. А. Лосев, О. П. Шаталов. Квантовая электроника, 1974, 1, 12, 2620.
11. Гринберг и др. РТК, 1972, 10, 11, 131.
12. В. Н. Крошко, Р. И. Солоухин, А. А. Фомин. ФГВ, 1973, 9, 3, 353.
13. А. С. Бирюков. Канд. дис. ФИАН, 1973.

### О ВОЗМОЖНОСТИ ПОЛУЧЕНИЯ ГЕНЕРАЦИИ НА МОЛЕКУЛЕ СО ЗА ФРОНТОМ ВОЛНЫ ПЕРЕСЖАТОЙ ДЕТОНАЦИИ В СМЕСИ $CS_2+O_2$

*В. М. Акулинцев, А. С. Башкин, Н. М. Горшунов, Ю. П. Немищенко,  
А. Н. Ораевский, В. И. Трушкин, Н. Н. Юрышев*

В [1] указывалось на возможную перспективность химических лазеров с инициированием реакций в детонационной волне. Экспериментально генерация излучения за фронтом волны пересжатой детонации наблюдалась впервые на молекулах HF в смеси  $F_2O+H_2$ , разбавленной аргоном [2].

Поиск условий генерации излучения за детонационной волной целесообразно начинать с исследования пересжатой детонации в связи с тем, что в таком режиме можно широко изменять температуру и плотность продуктов реакции путем использования смесей, лежащих вне концентрационных пределов самоподдерживающейся детонации.

Цель настоящей работы — исследование химической кинетики в одномерной по сечению волне пересжатой детонации в смеси  $CS_2+O_2+Ar$  и расчет коэффициента усиления излучения на колебательно-вращательных переходах молекул CO, образующихся в детонационной волне. Предполагается, что фронт детонации представляет собой комплекс из плоской ударной волны и следующей за ней зоны горения. Правомерность такой модели подтверждается тем, что согласно проделанным расчетам время индукции химических реакций более чем в 5 раз превышает время установления термодинамического равновесия за ударной волной. Поэтому сначала вычислялись параметры за фронтом ударной волны без учета химических превращений, а затем из уравнений химической кинетики методом Рунге — Кутты рассчитывались изменения концентраций всех компонентов. Каждый колебательный уровень молекулы CO ( $V$ ) с нулевого по семнадцатый принимался за отдельный компонент. Значения термодинамических величин  $p$ ,  $\rho$ ,  $T$  и скорости полагались постоянными до тех пор, пока тепловыделение в результате химических реакций оставалось меньшим заданного значения  $\Delta q$ . Затем рассчитывались новые значения термодинамических величин и скорости, соответствующие полученным концентрациям, и вычислялись константы скоростей химических реакций при новых значениях температуры. Учет изменения теплоемкостей с температурой проводился методом итераций. Найденные значения констант скоростей химических реакций и концентраций использовались для следующего цикла расчета.

Из литературных данных известно, что процесс горения в рассматриваемой смеси описывается по крайней мере 42 элементарными