

**ПОЛЕ КОНЦЕНТРАЦИЙ ВОЗБУЖДЕННЫХ МОЛЕКУЛ
В ДИФФУЗИОННОМ CO₂-N₂-ЛАЗЕРЕ**

*В. М. Маргулис, А. Д. Марголин, З. И. Каганова
(Москва)*

Инверсная населенность молекул CO₂ в диффузионном лазере возникает в результате резонансной перекачки колебательной энергии от возбужденных молекул азота к молекулам углекислого газа при перемешивании струй обоих газов [1—7]. В работе [8] рассмотрена кинетика релаксационных процессов при диффузионном перемешивании двух плоских полубесконечных струй рабочего газа (CO₂) и колебательно-возбужденного вспомогательного газа (N₂). Найдено приближенное аналитическое решение упрощенной системы диффузионно-кинетических уравнений, из которого следует, что максимум инверсной населенности находится в струе азота. Вслед за фронтом диффузии молекул углекислого газа в сторону возбужденного азота распространяется область колебательно-возбужденных молекул CO₂ — своеобразная «волна возбуждения».

В настоящей работе численным методом найдено распределение концентраций колебательно-возбужденных молекул при смешении конечных и полубесконечных струй углекислого газа и возбужденного азота.

Полубесконечные струи. Две плоские параллельные струи углекислого газа и колебательно-возбужденного азота движутся вдоль оси x с одинаковой скоростью v и приходят в соприкосновение в точке $x=0$ в момент $t=0$. Упрощенная система диффузионно-кинетических уравнений, описывающая процесс взаимодействия струй при допущениях, принятых в работах [5, 6, 8] (а именно: $\exp(-E_2/kT) \ll 1$, $\exp[-(E_1 - E_2)/kT] \ll 1$, где E_1, E_2 — энергия верхнего и нижнего лазерных уровней; время жизни колебательно-возбужденного азота значительно превосходит остальные характерные времена процесса; концентрация возбужденных молекул мала), запишется следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial \tau} &= -\beta n C(\xi, \tau) + \beta \theta N(\xi, \tau) + \frac{\partial^2 n}{\partial \xi^2}, & (1a) \\ \frac{\partial \theta}{\partial \tau} &= \beta n C(\xi, \tau) - \beta \theta N(\xi, \tau) - \alpha_1 \theta C(\xi, \tau) - \alpha_2 \theta N(\xi, \tau) + \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2}; \\ \frac{\partial C}{\partial \tau} &= \frac{\partial^2 C}{\partial \xi^2}, \\ \frac{\partial N}{\partial \tau} &= \frac{\partial^2 N}{\partial \xi^2}, & [(1б) \end{aligned}$$

Начальные условия: при $\tau=0$, $n=N=1$, $\theta=C=0$ ($\xi > 0$); и $C=1$, $n=\theta=N=0$ ($\xi < 0$). Граничные условия: $\xi = \pm \infty$, $\frac{\partial n}{\partial \xi} = \frac{\partial \theta}{\partial \xi} = \frac{\partial C}{\partial \xi} = \frac{\partial N}{\partial \xi} = 0$.

Здесь $n = \frac{[N_2^*]}{[N_2^*]_0}$, $N = \frac{[N_2]}{[N_2]_0}$ — удельная концентрация возбужденных и невозбужденных молекул азота; $\theta = \frac{[CO_2^*]}{[N_2^*]_0}$, $C = \frac{[CO_2]}{[CO_2]_0}$ — удельная концентрация возбужденных и невозбужденных молекул углекислого газа; $[N_2^*]_0$, $[N_2]_0 = [CO_2]_0$ — начальные концентрации (в момент $t=0$); $\tau = k_1[N_2]_0 t = \frac{k_1[N_2]_0 x}{v}$ — безразмерное время; $\xi = y \sqrt{\frac{D}{k_1[N_2]_0}}$ — безразмерная координата, направленная поперек потока; $\alpha_1 = \frac{k_1}{k_1} = 1$, $\alpha_2 = \frac{k_2}{k_1}$, где k_1 , k_2 — константы скоростей дезактивации возбужденных молекул углекислого газа на молекулах CO_2 и азота; $\beta = \frac{k_p}{k_i}$, где k_p — константа скорости резонансного обмена колебательным квантом между CO_2 и N_2 .

Если скорость резонансного обмена энергиями между молекулами углекислого газа и азота выше скорости остальных диффузионно-кинетических процессов, уравнения системы (1а) сводятся к одному [18]

$$\frac{\partial m}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 m}{\partial \xi^2} - m(C^2 + \alpha_2 CN), \quad (2)$$

где

$$m = \theta + n; \quad \theta = mC(\xi, \tau); \quad n = mN(\xi, \tau). \quad (3)$$

При $\tau=0$, $m=1$ ($\xi > 0$) и $m=0$ ($\xi < 0$); при $\xi = \pm \infty$ $\frac{\partial m}{\partial \xi} = 0$. Решение уравнений (2), (3) совместно с уравнениями системы (1б) дает распределение колебательно-возбужденных молекул CO_2 и N_2 по координатам ξ и τ . Отметим, что решение этой задачи зависит только от одного безразмерного параметра $m = f_1(\xi, \tau, \alpha_2)$.

В случае, когда релаксацией возбужденных молекул углекислого газа на азоте можно пренебречь по сравнению с релаксацией на углекислом газе, решение задачи становится универсальным, пригодным для любых значений параметров (D , k и т. п.).

Численный расчет проводился именно для этого случая. На рис. 1 изображено поле концентраций возбужденных молекул. Цифры, проставленные у линий, соответствуют величинам безразмерных концентраций. Во всей области, лежащей ниже верхней штрихпунктирной кривой, скорость дезактивации возбужденных молекул углекислого газа на углекислом газе превосходит скорость их дезактивации на азоте.

На рис. 2 приведено сопоставление результатов численного счета с вычислением по приближенной формуле [8]

$$\theta = 0,43 \left\{ 1 - \frac{\xi}{2\sqrt{\tau}} \right\}^8 \sqrt{\tau} \left\{ I_{-\frac{1}{4}} \left[\frac{\sqrt{\tau}}{2} \left(1 - \frac{\xi}{2\sqrt{\tau}} \right)^2 \right] - \frac{I_{-\frac{1}{4}}(2\sqrt{\tau})}{I_{\frac{1}{4}}(2\sqrt{\tau})} I_{\frac{1}{4}} \left[\frac{\sqrt{\tau}}{2} \left(1 - \frac{\xi}{2\sqrt{\tau}} \right)^2 \right] \right\}, \quad (4)$$

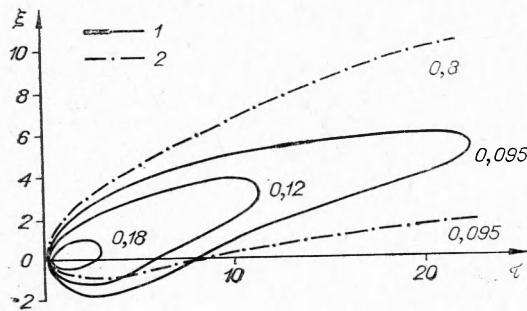


Рис. 1. Поле концентраций возбужденных молекул углекислого газа (1) и азота (2).

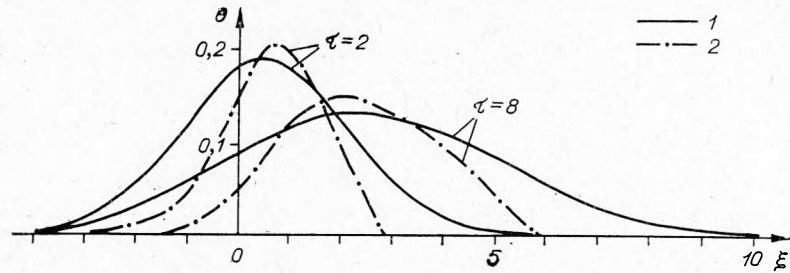


Рис. 2. Распространение концентрации возбужденных молекул углекислого газа, полученное методом численного счета (1) и по формуле (4)–(2).

которая качественно правильно описывает распространение «волны возбуждения» и максимальные значения концентрации возбужденных молекул углекислого газа. Расхождение значений концентраций вдали от максимума объясняется линейной интерполяцией функций $C(\xi, \tau)$ и $N(\xi, \tau)$ с отрезанием «хвостов» в области $|\xi| > 2\sqrt{\tau}$.

Чередующиеся струи возбужденного азота и «холодного» углекислого газа начинают перемешиваться в точке $x=0$ в момент времени $t=0$. Поперечный размер каждой струи одинаков и равен x_0 . Процесс диффузионного перемешивания и колебательной релаксации описывается системой уравнений (16), (2), (3) со следующими начальными и граничными условиями:

при $\tau=0$, $m=N=1$, $C=0$ для $0 < \xi \leq \frac{1}{2}$;

$$C=1, m=N=0 \text{ для } -\frac{1}{2} \leq \xi < 0;$$

при $\xi = \pm \frac{1}{2}$ $\frac{\partial m}{\partial \xi} = \frac{\partial C}{\partial \xi} = \frac{\partial N}{\partial \xi} = 0$.

Решение задачи о взаимодействии струй конечной ширины удобно проводить в безразмерных переменных $\xi = x/x_0$ и $\tau = tD/x_0^2$ при значении констант релаксации, умноженных на характерное время диффузии $\alpha_1 = \frac{k_1 [N_2]_0 x_0^2}{D}$; $\alpha_2 = \frac{k_2 [N_2]_0 x_0^2}{D}$, т. е. $m = f_2(\xi, \tau, \alpha_1, \alpha_2)$. Расчет поля концентраций возбужденных молекул проведен для трех вариантов (рис. 3, а, б, в): отношение α_1/α_2 принято равным 4, что соответствует отношению констант релаксаций $k_1/k_2=4$ [9].

Решение уравнения диффузии (2) с релаксационными членами для полосы дает своеобразную картину поля концентраций. При малых значениях τ ($\tau \ll 1$), когда дезактивация молекул незначительна, линии концентраций представляют собой характерные для диффузионного процесса замкнутые линии, исходящие из точек $\xi=0$ и симметричные относительно осей $\xi = \pm 1/2$. При больших значениях τ начинает сказываться влияние релаксационных процессов. На рис. 3 это проявляется в виде деформаций линий постоянной концентрации.

Функция θ на границах $\xi = \pm 1/2$ при изменении τ сначала растет (скорость подвода возбужденных молекул за счет процесса диффузии превосходит их релаксационную гибель), достигает максимума, затем падает (выполняется обратное соотношение). В точках, где функция θ достигает максимального значения, на линиях $\xi = \pm 1/2$ имеются особенности типа седла. При достаточно больших τ линии постоянной концентрации вырождаются в прямые, параллельные оси ξ , так как процесс перемешивания к этому времени заканчивается.

Как и в случае полубесконечных струй, область колебательно-возбужденных молекул углекислого газа распространяется в сторону струи азота.

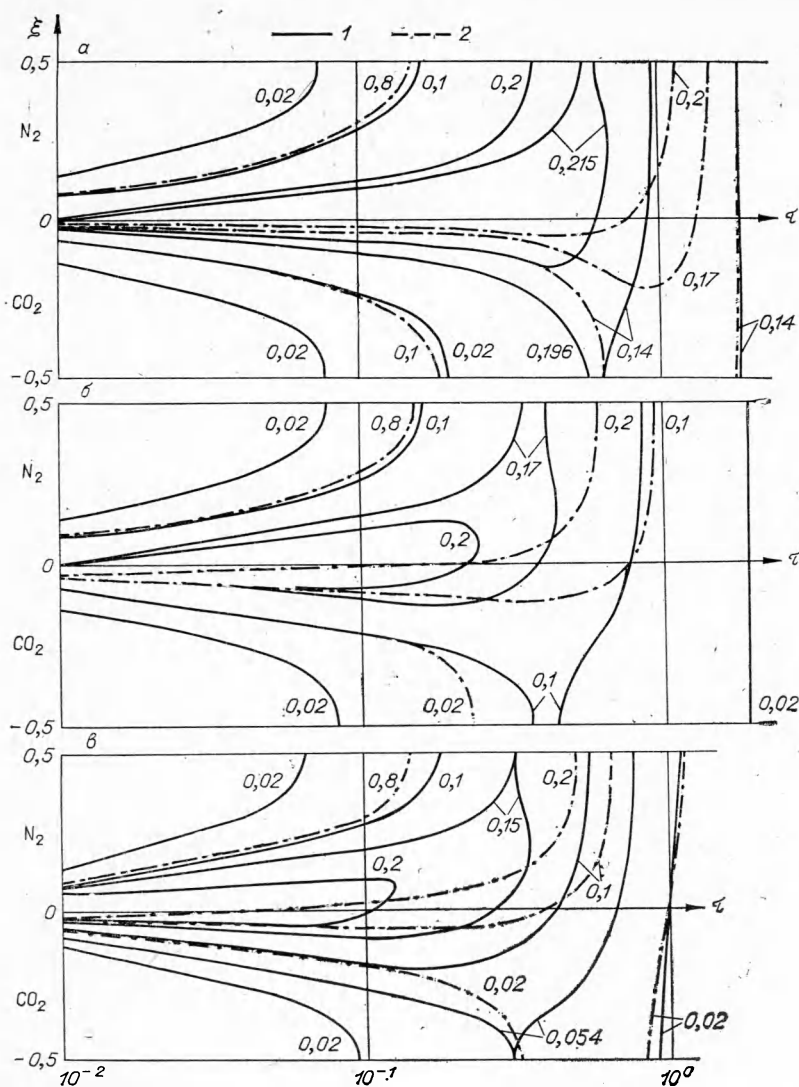


Рис. 3. Поле концентраций возбужденных молекул углекислого газа (1) и азота (2) для случаев:

а) $\alpha_1=1$, $\alpha_2=0,25$; б) $\alpha_1=5$, $\alpha_2=1,25$; в) $\alpha_1=10$, $\alpha_2=2,5$.

Коэффициент усиления лазерной среды из-за неоднородности распределения колебательно-возбужденных молекул CO_2 вдоль координаты ξ при диффузионном смешении струй будет являться функцией координат $G=G(\xi, \tau)$, причем $G(\xi, \tau) \sim \theta(\xi, \tau)$. Усреднение G по ξ позволяет вычислить средний коэффициент усиления среды вдоль координаты ξ :

$$G = [N_2^*]_0 \cdot F(p, T) \cdot \overline{\Delta\theta},$$

где $\overline{\Delta\theta}$ — усредненная по координате ξ величина инверсной населенности, а $F(p, T)$ — известная функция [7], учитывающая распределение колебательно-возбужденных молекул CO_2 по вращательным степеням свободы и зависящая от характера и величины уширения спектральной линии. $F(p, T)$ зависит от поступательной температуры газа, в общем случае — от давления p и слабо зависит от состава смеси азота и углекислого газа.

Если населенность верхнего лазерного уровня велика по сравнению с населенностью нижнего уровня (например, в случае достаточно низкой поступательной температуры газа), то

$$\overline{\Delta\theta} \approx \bar{\theta} = \int_{-\frac{1}{2}}^{+\frac{1}{2}} \theta d\xi. \quad (5)$$

Изменение коэффициента усиления среды вдоль потока для заданных p и T определяется интегралом (5), значение которого в функции координаты τ приведено на рис. 4. Величина θ с увеличением τ при малых значениях τ растет. Это объясняется увеличением числа возбужденных молекул CO_2 из-за перекачки колебательной энергии от возбужденных молекул азота в процессе диффузионного перемешивания. При $\tau \geq 1$ коэффициент усиления среды падает в результате колебательно-поступательной релаксации возбужденных молекул.

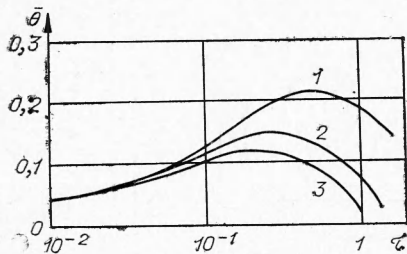


Рис. 4. Изменение усредненной по координате концентрации колебательно-возбужденных молекул для случаев. 1 — $\alpha_1=1$, $\alpha_2=0,25$; 2 — $\alpha_1=5$, $\alpha_2=1,25$; 3 — $\alpha_1=10$, $\alpha_2=2,5$.

Если в струю углекислого газа для увеличения скорости расселения нижнего лазерного уровня вводится в небольших количествах (менее 10%) дополнительный газ (например, пары воды), то распределение колебатель-

но-возбужденных молекул углекислого газа может быть найдено из решения тех же диффузионно-кинетических уравнений (2), (3) с другими коэффициентами

$$\alpha'_1 = [\alpha_3\rho + \alpha_1(1-\rho)](1-\rho);$$

$$\alpha'_2 = \alpha_4\rho + \alpha_2(1-\rho),$$

где α_3 , α_4 — безразмерные константы скоростей релаксации колебательно-возбужденных молекул CO_2 и азота на дополнительном газе; ρ — молярная доля примеси.

Поступила в редакцию
6/III 1973

ЛИТЕРАТУРА

1. С. К. N. Patel. Phys. Rev. Lett., 1964, 13, 617.
2. T. A. Cool, J. A. Shirley. Appl. Phys. Lett., 1969, 14, 70.
3. B. R. Bronfin et. al. Appl. Phys. Lett., 1970, 16, 214.
4. C. O. Brown. Appl. Phys. Lett., 1970, 17, 388.
5. Н. Г. Басов, А. Н. Ораевский, В. А. Щеглов. ЖТФ, 1970, 40, 173.
6. В. М. Маргулис, А. Д. Марголин. ЖТФ, 1971, 41, 2590.
7. H. A. Hasson, J. W. Bordeaux. AIAA J., 1972, 10, 414.
8. В. М. Маргулис, А. Д. Марголин. ЖТФ, 1972, 42, 647.
9. W. A. Rosser et. al. J. Chem. Phys., 1969, 50, 4996.