

03:07

## Численное моделирование влияния примесей атомарного кислорода на формирование инверсии при осесимметричном смещении потока иода с возбужденным кислородом

© А.А. Чукаловский, К.С. Клоповский, Т.В. Рахимова

НИИ ядерной физики им. Д.В. Скобельцына, МГУ, Москва  
E-mail: tinacious@rambler.ru

В окончательное редакции 29 ноября 2007 г.

Проведен параметрический анализ влияния процентного содержания атомарного кислорода в потоке  $O_2 : O_2(^1\Delta) : O$  на формирование инверсной населенности на лазерном переходе атомов иода и температурный режим при повышенных давлениях смеси  $P = 5$  Torr в системе с осесимметричным впрыскиванием смеси  $I_2 : He$  в возбужденный в ЭРГСК поток кислорода.

PACS: 42.60.Lh, 82.20.Wt, 82.40.-g

Успешная демонстрация работы кислород-иодного лазера (КИЛ), возбуждаемого электроразрядным генератором синглетного кислорода (ЭРГСК), при низких давлениях ( $\approx 2$  Torr) и степени возбуждения  $Y = [O_2(^1\Delta)]/[O_2] \approx 16 \div 18\%$  кислородного потока [1] стимулирует проведение исследований по масштабированию ЭРГСК по давлению. Рекордные значения выхода СК  $Y \approx 20\%$  реализованы в ЭРГСК на основе ВЧ (82 MHz) разряда в потоке кислорода при давлениях  $P \approx 5-10$  Torr [2,3]. Как показали эксперименты, наработка СК в этом типе разряда сопровождается диссоциацией молекулярного кислорода, причем с повышением энерговклада степень диссоциации становится сравнимой со степенью возбуждения СК. Как было установлено в [4,5], повышение вкладываемой в ВЧ-разряд мощности приводит к насыщению концентрации СК из-за тушения СК атомарным кислородом  $O(^3P)$  в трехтельной реакции (R1) из таблицы [3].

Теоретические оценки и модельные расчеты [4] свидетельствуют о том, что существует принципиальное ограничение на степень возбужде-

## Основные кинетические процессы

	Rates- $k$ , cm <sup>3</sup> /s	№	Ref.
$O_2(^1\Delta) + O + O_2(^3\Sigma) \xrightarrow{k_1} 2O_2(^3\Sigma) + O + [0.98 \text{ eV}]$	$2.5 \cdot 10^{-32} \text{ cm}^6/\text{s}$	(R1)	[3]
$I^*(^2P_{1/2}) + O \xrightarrow{k_2} I(^2P_{3/2}) + O + [0.94 \text{ eV}]$	$3.5 \cdot 10^{-12}$	(R2)	[1]
$I_2 + O \xrightarrow{k_3} IO + I(^2P_{3/2}) + [0.26 \text{ eV}]$	$1.4 \cdot 10^{-10}$	(R3)	[9]
$IO + O \xrightarrow{k_4} O_2(^3\Sigma) + I + [3.32 \text{ eV}]$	$3.0 \cdot 10^{-11}$	(R4)	[9]
$I_2 + O_2(^1\Delta) \xrightarrow{k_5} I_2(v) + O_2(^3\Sigma) + [0.47 \text{ eV}]$	$7 \cdot 10^{-15}$	(R5)	[9]
$I_2 + I^*(^2P_{1/2}) \xrightarrow{k_6} I(^2P_{3/2}) + I_2(v) + [0.43 \text{ eV}]$	$3.5 \cdot 10^{-11}$	(R6)	[9]
$I_2(v) + O_2(^1\Delta) \xrightarrow{k_7} 2I(^2P_{3/2}) + O_2(^3\Sigma) - [0.046 \text{ eV}]$	$3 \cdot 10^{-10}$	(R7)	[9]
$O_2(^1\Delta) + I(^2P_{3/2}) \xrightarrow{k_8} O_2(^3\Sigma) + I^*(^2P_{1/2}) + [0.04 \text{ eV}]$	$7.8 \cdot 10^{-11}$	(R8)	[9]

ния СК ( $Y \leq 25\%$ ) в электрических разрядах. В экспериментах было показано, что уменьшить тушение  $O_2(^1\Delta)$  в реакции (R1) можно за счет связывания атомарного кислорода в гетерогенных [2,3] и объемных [1] процессах. Однако на сегодняшний день вопрос о предельно допустимом уровне содержания атомарного кислорода в возбужденном потоке открыт. Решение этого вопроса важно еще и потому, что в работе [1] показано, что атомы  $O(^3P)$  эффективно тушат верхний лазерный уровень в атоме иода  $I^*(^2P_{1/2})$ . Таким образом, детальное исследование кинетики процессов с участием атомарного кислорода в зоне смешения КИЛ актуально для оптимизации состава возбужденного потока кислорода, поступающего из ЭРГСК.

В данной работе представлены результаты численного моделирования кинетики процессов, происходящих при подмешивании молекулярного иода в возбужденный в ЭРГСК кислородный поток в условиях, приближенных к КИЛ с ЭРГСК. В настоящее время, помимо результатов работы [1], в работе [6] представлены результаты по генерации в системе с ЭРГСК, когда выход СК составлял  $Y = 5-5.7\%$  при давлении в десятки Торр. Генерация при таких значениях  $Y$  была получена за счет охлаждения смеси при сверхзвуковом смешении потока иода с возбужденным кислородом и, следовательно, понижении порогового для генерации значения  $Y_{th}$ . Однако для детального исследования влияния кинетических процессов на формирование инверсии мы выбрали условия, близкие к эксперименту [1] в дозвуковом смешении

нии. Моделирование проводилось в предположении осесимметричного впрыскивания смеси  $I_2$ : Не через одиночный инжектор в аксиально-симметричный, дозвуковой поток кислорода, возбужденный в ЭРГСК. Течение газа полагалось установившимся, скорость прокачки газа — постоянной. Инжекция смеси  $I_2$ : Не осуществлялась через отверстие радиуса  $R_0$  при давлении  $P_0$ . На первой стадии впрыскиваемая смесь адиабатически расширяется до давления  $P$ , равного давлению кислорода, температуры  $T_{inj}$  и радиуса инжекции  $R_{inj} > R_0$ , на второй — происходит перемешивание потоков за счет радиального тепло- и массопереноса. Математическая модель, которая описывает такое диффузионное перемешивание потоков при постоянном давлении, является квазидвумерной. Она включает в себя уравнение теплопроводности и систему уравнений непрерывности для компонентов смеси  $I_2$ ,  $I_2(v)$ ,  $I_2(B^3)$ ,  $I^*$ ,  $I$ ,  $IO$ ,  $O_2(^1\Delta)$ ,  $O_2(^1\Sigma)$ ,  $O_2(^3\Sigma)$ ,  $O$ ,  $O_3$  в цилиндрической симметрии:

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

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

с граничными условиями:

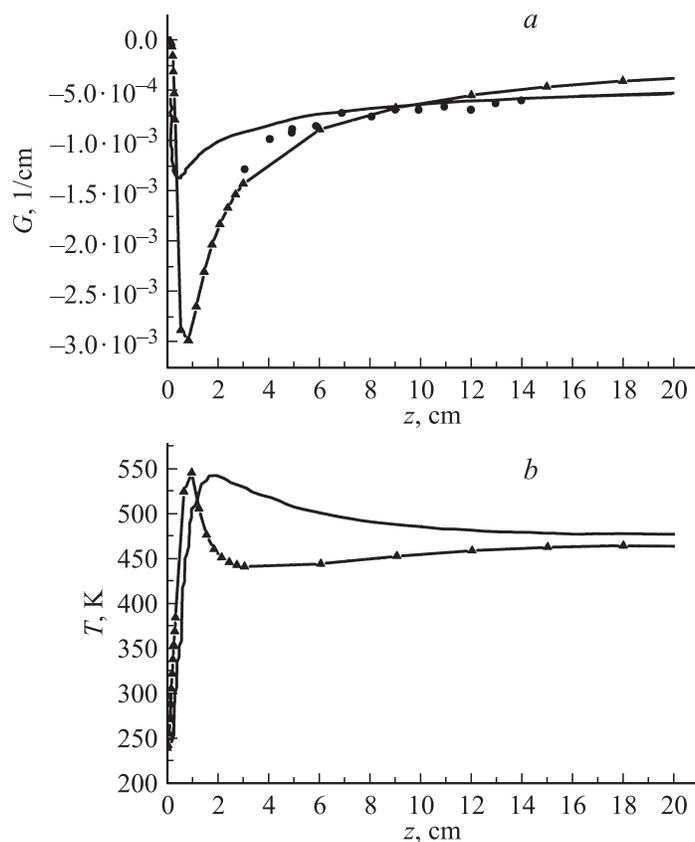
$$\left( D_i \frac{\partial n_i}{\partial r} \right)_{r=R} = -\frac{\gamma_i v_T n_i}{4}, \quad T_{r=R} = T_{wall};$$

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

где  $n_i$  — концентрации компонентов смеси,  $T$  — температура газа,  $C_{p_i}$  — изобарная теплоемкость компонент газа,  $R_i$  — скорости и дефекты,  $v_f$  — скорость прокачки газа,  $\gamma_i$  — вероятность поверхностной реакции с участием  $i$ -й компоненты смеси на стенке трубки,  $v_T$  — тепловая скорость частиц,  $R$  — радиус трубки (2.5 cm),  $T_{wall}$  — температура стенки трубки,  $P$ ,  $T_{ox}$  — давление и температура потока кислорода,  $T_{inj}$  и  $R_{inj}$  — температура и радиус потока  $I_2$ : Не после адиабатического

расширения,  $k_b$  — постоянная Больцмана,  $\chi_i$  и  $\eta_i$  — мольная доля компонентов в потоке кислорода и в потоке  $I_2$ : Не соответственно,  $z$  — транспортная координата. Коэффициенты переноса:  $D_i$  — диффузии,  $D_i^T$  — термодиффузии,  $\lambda$  — теплопроводности — рассчитывались в соответствии с процедурой, изложенной в [7] с использованием коэффициентов Леннарда–Джонса для компонент газа из работы [8]. В расчеты включена система химических реакций для КИЛ с ЭРГСК [9], в том числе и реакции (R1–R8) из таблицы. Коэффициенты усиления  $G$  на сверхтонком переходе атома иода ( $F = 3 \rightarrow F = 4$ ) рассчитывался из соотношения для коэффициента усиления (поглощения) слабого сигнала [10].

В работе [9] проведено экспериментально-теоретическое исследование влияния температурного режима смеси на коэффициент усиления смеси. Было показано, что снижение температуры потока кислорода  $T_{ox}$  на входе в зону смешения КИЛ, а также повышение степени предварительной диссоциации иода  $D(I_2)$  приводит к существенному снижению пороговых значений  $Y_{th}$  и, следовательно, к увеличению коэффициента усиления. Тестирование разработанной нами модели производилось при сравнении результатов расчета коэффициента усиления и температуры смеси на нашей модели с результатами моделирования с использованием газодинамической модели Blaze II в работе [9] и экспериментальными данными [9] при условиях:  $P = 1.94$  Торг,  $T_{ox} = 340$  К,  $Y = 16\%$ , содержание  $\chi(O) = 16\%$ ,  $\chi(O_2(^1\Sigma)) = 2\%$ ,  $\eta(I_2)/\eta(He) = 1/40$ . В данной работе эффективный радиус  $R_{inj}$  и температура  $T_{inj}$  инжектируемого потока, эффективная скорость потока  $v_f$  являются параметрами задачи. Наилучшие результаты расчетов  $G$  и  $T$  в сравнении с экспериментальными данными [9] были получены при параметрах:  $R_{inj} = 0.4$ ,  $T_{inj} = 240$  К и  $v_f = 100$  м/с (рис. 1). Из рис. 1 видно, что представленная модель удовлетворительно передает основные тенденции изменения профилей коэффициента поглощения и температуры от транспортной координаты  $z$ . Различия в положении максимумов температуры и коэффициента поглощения между нашими расчетами и расчетами [9] объясняются тем, что в данной модели не учтено реальное поле скоростей смешиваемых потоков. С учетом реального поля скоростей аксиальные теплопроводность и диффузия могут оказывать влияние на распределение температуры и компонент по потоку. Тем не менее данная модель передает основные особенности диффузионного перемешивания двух дозвуковых потоков кислорода и

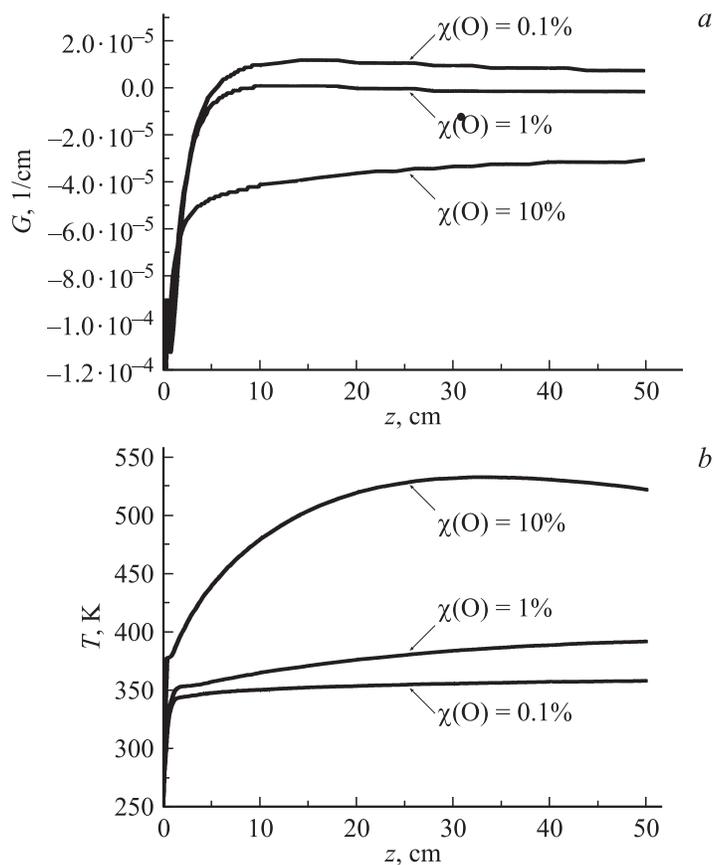


**Рис. 1.** Распределение  $G$  ( $a$ ) и температуры смеси ( $b$ ) по длине зоны смешения.  $P = 1.94 \text{ Torr}$ ,  $T_{ox} = 340 \text{ K}$ ,  $Y = 16\%$ ,  $\eta(\text{I}_2)/\eta(\text{He}) = 1/40$ . Сплошной линией обозначен результат расчета по модели Blaze II из работы [9], точками — экспериментальные данные [9], линией с треугольными символами — расчет с использованием нашей модели.

смеси  $\text{I}_2:\text{He}$ . Поэтому с ее помощью можно быстро и с минимальными расчетными затратами исследовать кинетику процессов и их влияние на коэффициент усиления и температурный режим с учетом радиальных неоднородностей распределения температуры и концентраций газов.

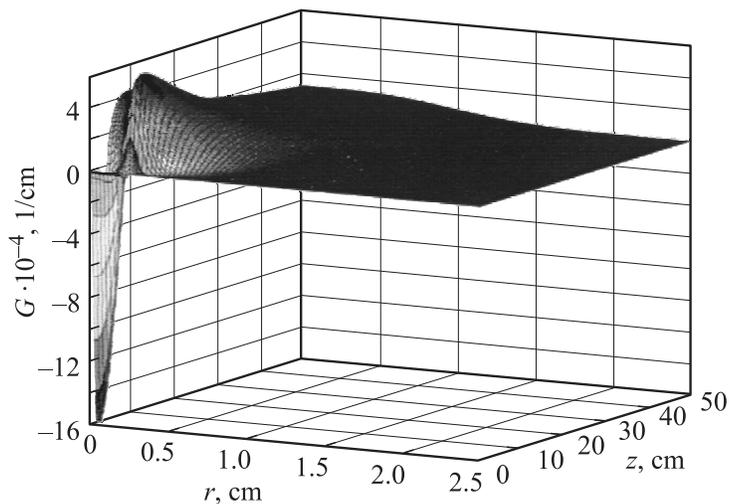
Как показали расчеты, основными процессами, определяющими температурный режим смеси при перемешивании, являются: диссоциация  $I_2$  в реакциях (R3–R7) и тушение  $I^*$  в (R2) (см. таблицу). В реакциях (R3–R7) суммарное энерговыделение составляет  $\sim 4.34$  eV. При этом происходит резкий скачок температуры (рис. 1) до  $T = 550$  К. Коэффициент  $G$  имеет сильный провал, так как идет наработка атомарного иода при диссоциации  $I_2$ . Далее смесь остывает за счет теплопроводности, и происходит передача возбуждения от СК к  $I(^2P_{3/2})$  в реакции (R8). Температура смеси составляет при этом  $T = 450$  К, а содержание СК  $Y = 16\%$ . При такой температуре пороговое значение содержания СК для возникновения усиления составляет  $Y_{th} > 22\%$  [9] (с учетом тушения  $I^*$  в реакции (R2)), поэтому  $G < 0$ . Повышение температуры на расстояниях  $z \geq 5$  см определяется выделением тепла при тушении  $I^*$  атомами O в (R2).

Далее с использованием протестированной модели был проведен параметрический анализ влияния процентного содержания атомарного кислорода на коэффициент усиления и температурный режим при повышенных давлениях смеси  $P = 5$  Torr. Расчеты проводились при содержаниях  $O_2(^1\Delta)$ , близких к рекордным для ВЧ ЭРГСК [2,3]. На рис. 2 представлен результат расчета  $G$  и  $T$  смеси при  $Y = 20\%$  степени диссоциации —  $D(I_2) = 50\%$ , при варьировании  $\chi(O) = 0.1, 1$  и  $10\%$ . Радиус  $R_{inj}$  и температура  $T_{inj}$  задавались равными  $0.25$  см и  $240$  К соответственно, а скорость прокачки  $v_f = 100$  m/s. Расчет смеси с содержанием атомов O, равным  $10\%$ , проведен для иллюстрации влияния больших  $\chi(O)$  на  $G$  и  $T$  смеси в предположении получения рекордных  $Y$  при высоких  $\chi(O)$ . Было установлено, что основным каналом диссоциации иода являются реакции (R3, R4). Поэтому присутствие атомов O в смеси снижает расход СК на разложение  $I_2$  в реакциях (R5–R7). Но, с другой стороны, концентрация атомарного кислорода в зоне смешения даже в минимальных  $\chi(O) \approx 1\%$  количествах (рис. 2) приводит к росту температуры смеси за счет энерговыделения в реакции (R2) при тушении  $I^*$  атомами O. При этом по всей длине зоны смешения  $G(\chi(O) = 1\%) \cong 0$ . Содержание  $\chi(O) = 10\%$  приводит к разогреву смеси в реакции (R2) до  $T = 540$  К на длине трубки  $z = 35$  см. Происходит значительное тушение СК в (R1), так что содержание  $O_2(^1\Delta)$  падает в  $\sim 1.25$  раза. По всей длине трубки  $G < 0$ . При  $\chi(O) = 0.1\%$  эффективность процесса тушения  $I^2$  в (R2) существенно снижена, и температура газа слабо меняется по длине



**Рис. 2.** Распределение усредненного диаметру трубки  $G$  (а) и температуры смеси (на оси) (b) по длине зоны смешения.  $D(I_2) = 50\%$ ,  $\chi(O) = 0.1, 1$  и  $10\%$ ,  $P = 5 \text{ Torr}$ ,  $T_{ox} = 340 \text{ K}$ ,  $Y = 20\%$ ,  $\eta(I_2)/\eta(\text{He}) = 1/100$ .

зоны смешения (рис. 2). Таким образом, содержание атомов O в смеси менее 1% при условиях  $P = 5 \text{ Torr}$ ,  $D(I_2) = 50\%$ ,  $Y = 20\%$  и  $T_{ox} = 340 \text{ K}$  допустимо для получения  $G > 0$ . Отметим, что повышение давления кислорода с 2 до 5 Torr приводит к тому, что при заданной доле  $\chi(O)$  в смеси время протекания кинетических процессов накачки  $I^*$



**Рис. 3.** Распределение коэффициента усиления  $G$  по длине и радиусу зоны смешения.  $P = 5 \text{ Torr}$ ,  $T_{\text{ox}} = 240 \text{ K}$ ,  $Y = 20\%$ ,  $\chi(\text{O}) = 0.1\%$ ,  $\eta(\text{I}_2)/\eta(\text{He}) = 1/100$ .

в (R8) и тушения  $\text{O}_2(^1\Delta)$  и  $\text{I}^*$  в (R1, R2) уменьшается. В то же время длины теплопроводности и диффузии вдоль радиальной оси возрастают в 2.5 раза. Возникает неоднородность распределения  $G$  по радиусу [11] на всей длине зоны смешения (рис. 3). Поэтому расчет коэффициента усиления, усредненного по диаметру зоны смешения, физически более обоснован (рис. 2). Это необходимо учитывать при интерпретации экспериментальных данных.

Таким образом, представленная в данной работе квазидвумерная модель диффузионного смешения потоков  $\text{I}_2:\text{He}$  и кислорода, возбужденного в ЭРГСК, позволяет получать прогностические оценки влияния вариации параметров смеси на температурный режим и усилительные свойства среды. Показано, что присутствие атомарного кислорода в смеси существенно влияет на формирование инверсии на лазерном переходе в атоме иода. Снижение концентрации атомов  $\text{O}$  является одним из основных условий формирования инверсии. Так, при содержании  $\chi(\text{O}) \leq 1\%$  коэффициент усиления положительный при  $Y = 20\%$ ,  $P = 5 \text{ Torr}$ .

Работа выполнена при поддержке грантов: ведущая научная школа НШ-7101.2006, РФФИ-№ 06-02-16537.

## Список литературы

- [1] *Carroll D.L., Verdeyen J.T., King D.M.* et al. // IEEE Journal of Quantum Electronics. 2005. V. 41. N 2. P. 213–223.
- [2] *Rakhimova T.V., Kovalev A.S., Klopovsky K.S.* et al. // 36<sup>th</sup> AIAA Plasmadynamics and Lasers Conference. Toronto, 6–9 June 2005.
- [3] *Rakhimova T.V.* et al. // 37<sup>th</sup> AIAA Plasmadynamics and Lasers Conference. San Francisco, 5–8 June 2006.
- [4] *Proshina O.V., Rakhimova T.V., Braginsky O.V.* et al. // J. Phys. D: Appl. Phys. 2006. V. 39. P. 5191–5200.
- [5] *Braginsky O.V., Kovalev A.S., Lopaev D.V.* et al. // J. Phys. D: Appl. Phys. 2006. V. 39. P. 5183–5190.
- [6] *Hicks A., Tirupathi S., Jiang N.* et al. // J. Phys. D: Appl. Phys. 2007. V. 40. P. 1408–1415.
- [7] *Perin J., Leroy O., Bordage M.C.* // Contrib. Plasma Phys. 1996. V. 36. P. 3.
- [8] *Kushner M.* H2D2XS Database, <http://uigelz.ece.iastate.edu>
- [9] *Carroll D.L., Verdeyen J.T., King D.M.* et al. // IEEE Journal of quantum electronics. 2003. V. 39. N 9. P. 1150–1159.
- [10] *Юрышев Н.Н.* // Квантовая электроника. 1996. Т. 23. № 7. С. 583–600.
- [11] *Чукаловский А.А., Клоповский К.С., Рахимова Т.В.* // Всероссийская конференция по физике низкотемпературной плазмы ФНТП-2007. Петрозаводск, 24–28 июня 2007 г. Т. 1. С. 149–154.