

# Математическое моделирование процесса усиления лазерного излучения на длине волны 1790 нм в ядерно-возбуждаемой He–Ar-плазме, содержащей нанокластеры соединений урана

В.А.Косарев, Е.Э.Кузнецова

*Рассмотрена возможность использования пылевых лазерно-активных сред в лазерах с ядерной накачкой. Методами математического моделирования изучен процесс усиления излучения на длине волны 1790 нм в ядерно-возбуждаемой пылевой He–Ar-плазме. С помощью специально разработанной кинетической модели, содержащей 72 компонента и более 400 реакций, исследовано влияние нанокластеров на компонентный состав рассматриваемой среды и на кинетику протекающих в ней процессов. Анализ полученных результатов свидетельствует о принципиальной возможности усиления в активной лазерной He–Ar-среде, содержащей нанокластеры металлического урана и диоксида урана размером 10 нм.*

**Ключевые слова:** нанокластеры, ядерно-возбуждаемая плазма, кинетические процессы, осколки деления, лазерное излучение.

## 1. Введение

Применение лазерных активных сред с распыленным в них делящимся веществом представляется весьма привлекательным и перспективным. Основная причина этого заключается в значительном (на порядок) увеличении доли энергии, вносимой осколками деления (ОД) в активную лазерную среду, по сравнению со случаем гетерогенной накачки, когда делящееся вещество напылено на стенки лазерно-активного элемента [1]. Однако проблемы, связанные с наличием в активной среде лазера пылевых частиц, пока препятствуют освоению этой безусловно перспективной технологии. Помимо проблем технологического характера, возникающих при работе с радиоактивными частицами нанометровых размеров, речь идет, в первую очередь, о процессах экстинкции (ослабления) лазерного излучения (ЛИ) на пылевых частицах. Кроме того, возможно негативное влияние пылевых частиц на компонентный состав среды, что может существенно ухудшить генерационные характеристики. Проблему экстинкции ЛИ, как показали расчеты [2], можно решить, если использовать пылевые частицы размером 10 нм в средах, генерирующих ЛИ в ИК диапазоне. Кинетика же сред с пылевыми частицами и структурами практически не изучена, особенно в случае ядерно-возбуждаемой плазмы (ЯВП).

В работах [2–4] с помощью специально созданных кинетических моделей He- и He–Ar-ЯВП была проведена оценка влияния нанокластеров на компонентный состав сред. Полученные результаты свидетельствовали об изменении концентраций электронов и молекулярных ионов плазмы в несколько раз при наличии нанокластеров в концентрации не менее  $10^{11}$  см<sup>-3</sup>. В соответствии с резуль-

татами работы [5] при таких концентрациях среда способна размножать нейтроны. Также было получено усиление слабого сигнала в He–Ar-среде на длине волны 1790 нм. Однако в [2, 4] при построении модели для упрощения не был учтен ряд процессов, в частности возможное разрушение нанокластеров при столкновении с осколками деления, а также поуровневая кинетика верхнего лазерного уровня, который рассматривался как объединенный.

В настоящей работе изучается влияние нанокластеров соединений урана размером 10 нм на кинетику и компонентный состав He–Ar-ЯВП с учетом их разрушения в результате столкновения с ОД. Методами математического моделирования с помощью расширенной кинетической модели проводится исследование процесса усиления в рассматриваемой среде излучения на длине волны 1790 нм.

## 2. Кинетическая модель He–Ar-ЯВП, содержащей нанокластеры соединений урана, с учетом их разрушения

Разработанная ранее кинетическая модель [2] включает в себя 51 компонент и более 200 реакций. Подробное описание физико-химических процессов в незапыленной He–Ar-ЯВП, в том числе процессов заселения и расселения лазерных уровней, представлено, например, в работе [6]. Особенность же этой модели [2] заключалась в том, что помимо поуровневой кинетики возбужденных состояний атомов аргона и гелия (за исключением верхнего лазерного уровня  $\text{Ar}(3d[1/2]_{1,0})$ ) в ней учитывалась дискретность процесса передачи заряда нанокластерам, т. е. реакции всех заряженных кластеров с заряженными компонентами среды. Как показало сравнение с результатами работы [6], модель вполне корректно описывает кинетику среды без пыли [4] (рис. 1).

Тем не менее в модели не учитывалось возможное разрушение кластеров в результате их столкновения с ОД. Основанием для этого послужил тот факт, что в условиях, характерных для ЯВП, и при мощностях накачки

В.А.Косарев, Е.Э.Кузнецова. ГНЦ РФ «Физико-энергетический институт им А.И.Лейпунского», Россия, Калужская обл, 249033 Обнинск, пл. Бондаренко, 1; e-mail: vsevolod.kosarev@mail.ru, Kuznetsova.Elena\_IPPE@mail.ru

Поступила в редакцию 17 сентября 2013 г., после доработки – 25 декабря 2013 г.

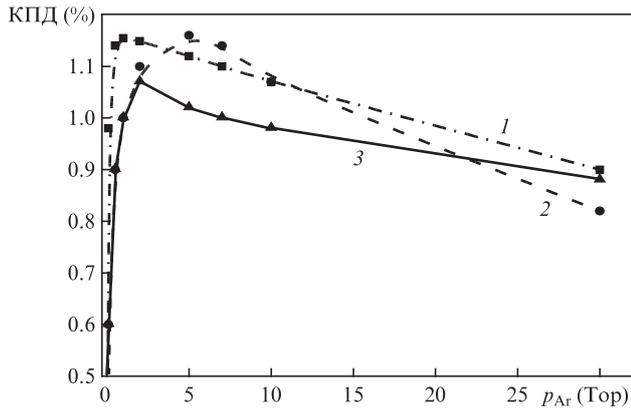


Рис.1. Зависимости КПД генерации на линии с  $\lambda = 1790$  нм от давления Ar при давлении He–Ar-смеси 1 атм, рассчитанные в настоящей работе (1) и в [6] (2), а также полученные в эксперименте [7] (3).

до 1 кВт/см<sup>3</sup> данные процессы не будут оказывать существенного влияния на генерационные характеристики среды. Однако учет этого механизма необходим для более корректного описания протекающих в среде процессов и для большей вариативности модели относительно внешних условий.

Таким образом, в настоящей работе помимо реакций заряженных нанокластеров с заряженными компонентами плазмы в кинетическую схему были добавлены процессы разрушения нанокластеров при столкновении с ОД и соответственно реакции взаимодействия разделенных кластеров с компонентами плазмы. При этом считалось, что при столкновении происходит разрушение кластера на две одинаковые части. Еще одним усовершенствованием модели стал учет поуровневой кинетики уровня Ar(3d), в который входит верхний лазерный подуровень Ar(3d[1/2]<sub>1,0</sub>).

Расширенная кинетическая модель включает в себя более 400 реакций и 72 компонента: атомы гелия в основном состоянии и в десяти нижних возбужденных состояниях, атомарный и молекулярный ионы гелия He<sup>+</sup>, He<sub>2</sub><sup>+</sup>, атомы аргона в основном состоянии и в возбужденных состояниях 4s, 4s', 4p, 4p', 3d, 3d', атомарные и молекулярные ионы аргона Ar<sup>+</sup>, Ar<sub>2</sub><sup>+</sup>, гетероядерные ионы HeAr<sup>+</sup>, эксимеры аргона, электроны и заряженные нанокластеры с зарядами до 10. Реакции, вносящие наибольший вклад в кинетику в рамках созданной кинетической модели, представлены в табл.1.

Кроме плазмохимических реакций из табл.1 и других реакций между газовыми компонентами плазмы в схему добавлены реакции взаимодействия заряженных компонентов плазмы с нанокластерами, которые аналогично работе [2] схематически можно представить следующим образом:



где e, D<sup>n-</sup>, I<sup>+</sup> – соответственно электрон, заряженные нанокластеры (n – заряд нанокластера в единицах заряда электрона) и любой положительно заряженный атомарный или молекулярный ион газовой смеси. Учитывалось взаимодействие пылевых частиц именно с заряженными компонентами плазмы – как наиболее сильное.

Табл.1. Основные реакции в гелий-аргоновой смеси.

Реакция	Константа скорости (см <sup>3(m-1)</sup> /с)	Литература
He <sub>2</sub> <sup>+</sup> + e → He <sup>+</sup> + He		[8]
He <sup>+</sup> + He + He → He <sub>2</sub> <sup>+</sup> + He	4.85 × 10 <sup>-32</sup>	[8]
He <sup>**</sup> + He* → He <sup>+</sup> + e + He	4.5 × 10 <sup>-9</sup>	[9]
He + He* → He <sub>2</sub> <sup>+</sup> + e	8.7 × 10 <sup>-11</sup>	[9]
He + e → H <sup>+</sup> + e + e		[10]
He + e → He* + e		[10]
He <sub>2</sub> <sup>+</sup> + Ar → He + Ar <sup>+</sup> + He	2.0 × 10 <sup>-10</sup>	[6]
He <sub>2</sub> <sup>+</sup> + Ar + He → He + Ar <sup>+</sup> + He + He	5.0 × 10 <sup>-31</sup>	[6]
He + Ar <sup>+</sup> + He → HeAr <sup>+</sup> + He	(0.026/T <sub>g</sub> ) <sup>0.75</sup> × 10 <sup>-32</sup>	[6]
He + Ar <sup>+</sup> + Ar → Ar <sub>2</sub> <sup>+</sup> + He	1.9 × 10 <sup>-31</sup>	[11]
HeAr <sup>+</sup> + Ar → He + Ar <sub>2</sub> <sup>+</sup>	3.6 × 10 <sup>-9</sup>	[6]
He <sup>+</sup> + He + Ar → He <sub>2</sub> <sup>+</sup> + Ar	0.8 × 10 <sup>-33</sup> /T <sub>g</sub>	[6]
Ar + e → Ar* + e		[12]
Ar(4p[3/2] <sub>1,2</sub> ) + Ar → Ar + Ar	9.5 × 10 <sup>-11</sup>	[6]
Ar(3d[1/2] <sub>0,1</sub> ) + Ar → Ar + Ar	3.1 × 10 <sup>-11</sup>	Оценка по данным [6]
Ar(4p[3/2] <sub>1,2</sub> ) + He → He + Ar	6.0 × 10 <sup>-12</sup>	Оценка по данным [6]
Ar(3d[1/2] <sub>0,1</sub> ) + He → He + Ar	2.0 × 10 <sup>-12</sup>	Оценка по данным [6]
Ar(3d[1/2] <sub>0,1</sub> ) → Ar(4p[3/2] <sub>1,2</sub> ) + hν	1.1 × 10 <sup>6</sup>	[6]
Ar <sub>2</sub> <sup>+</sup> + e → Ar(3d[1/2] <sub>0,1</sub> ) + Ar		Оценка по данным [9]

Примечания: T<sub>g</sub> – температура газовой смеси в градусах Кельвина; m – число компонентов, участвующих в реакции; для реакций с участием электронов константы скоростей не указаны, поскольку при расчетах использовались энергетические зависимости сечений взаимодействия.

Математическая модель включает в себя стандартную систему интегродифференциальных уравнений кинетики:

$$\frac{d[X_i]}{dt} = \sum_k (v_{ik} - \mu_{ik}) R_k, \quad i = 1, \dots, 72. \quad (3)$$

Система (3), являющаяся жесткой нелинейной системой дифференциальных уравнений, решалась методом Гира. Расчет электронной кинетики проводился с помощью решения интерполяционным методом уравнения Больцмана для сферически-симметричной части функции распределения электронов по энергиям. Расчеты проведены с использованием модернизированного программного комплекса [13].

### 3. Полученные результаты и их обсуждение

В настоящей работе рассматривалась кинетика гелий-аргоновой ЯВП, содержащей нанокластеры соединений урана. Исследовалась смесь He:Ar = 400:1 при давлениях 3 и 5 атм и удельных мощностях энерговыклада в среду 125 и 250 Вт/см<sup>3</sup>. Длительность импульса выбиралась равной 50 мс. Под нанокластером при моделировании подразумевалась частица сферической формы размером 10 нм, коэффициент прилипания электронов и ионов к которой брался равным единице.

На рис.2 представлены квазистационарные концентрации заряженных компонентов плазмы в зависимости

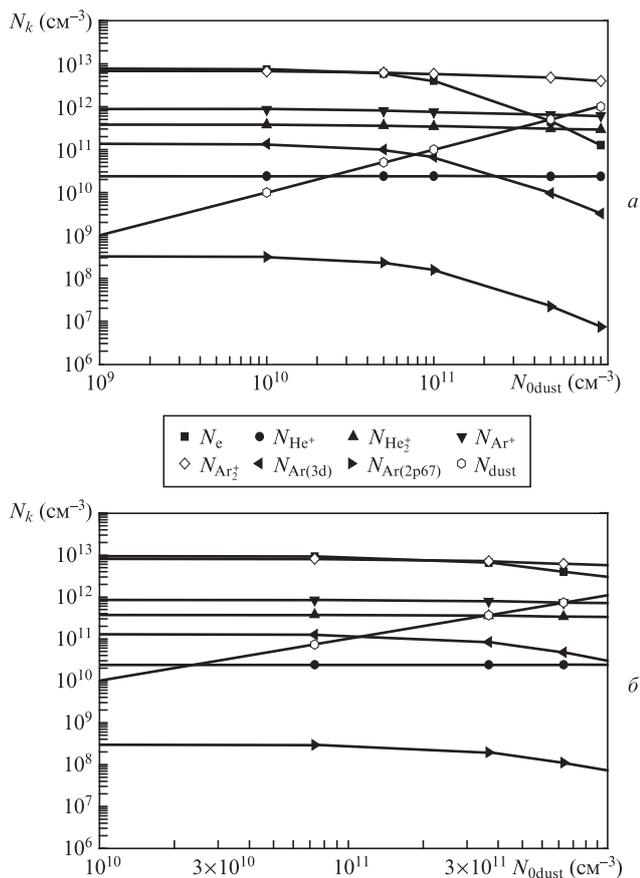


Рис.2. Зависимости квазистационарных концентраций основных компонентов плазмы  $N_k$  от начальной концентрации нанокластеров  $N_{0\text{dust}}$  при давлении смеси 3 (а) и 5 атм (б).

от начальной концентрации нанокластеров при различных давлениях и мощности энерговыклада  $125 \text{ Вт/см}^2$ . Видно, что концентрации электронов, молекулярных ионов гелия и аргона с увеличением концентрации нанокластеров свыше  $10^{11} \text{ см}^{-3}$  уменьшаются. Подробный кинетический анализ среды показал, что в рассматриваемых условиях вклад пылевых частиц в процесс разрушения молекулярных ионов аргона составляет не более 20%. В то же время основным каналом заселения верхнего лазерного уровня является диссоциативная рекомбинация молекулярного иона аргона. Вклад остальных реакций по сравнению с этим каналом незначителен. Это означает, что нанокластеры существенно влияют на генерационные характеристики гелий-аргоновой среды. В связи с этим были рассчитаны линейные коэффициенты усиления слабого сигнала гелий-аргоновой средой, содержащей нанокластеры различных соединений урана, с учетом ослабления ЛИ на пылевых частицах (рис.3). Коэффициенты ослабления рассчитывались, как и в работе [5], для частиц размером 10 нм из металлического урана и диоксида урана на длине волны ЛИ 1790 нм.

Таким образом, расширение кинетической модели путем добавления процессов разрушения нанокластеров, а также поуровневой кинетики уровня  $\text{Ar}(3d)$  позволило уточнить генерационные характеристики. Об этом свидетельствует сравнение линейных коэффициентов усиления, рассчитанных с помощью прежней и расширенной моделей (рис.4).

Отметим также, что согласно результатам проведенного математического моделирования доля разрушенных

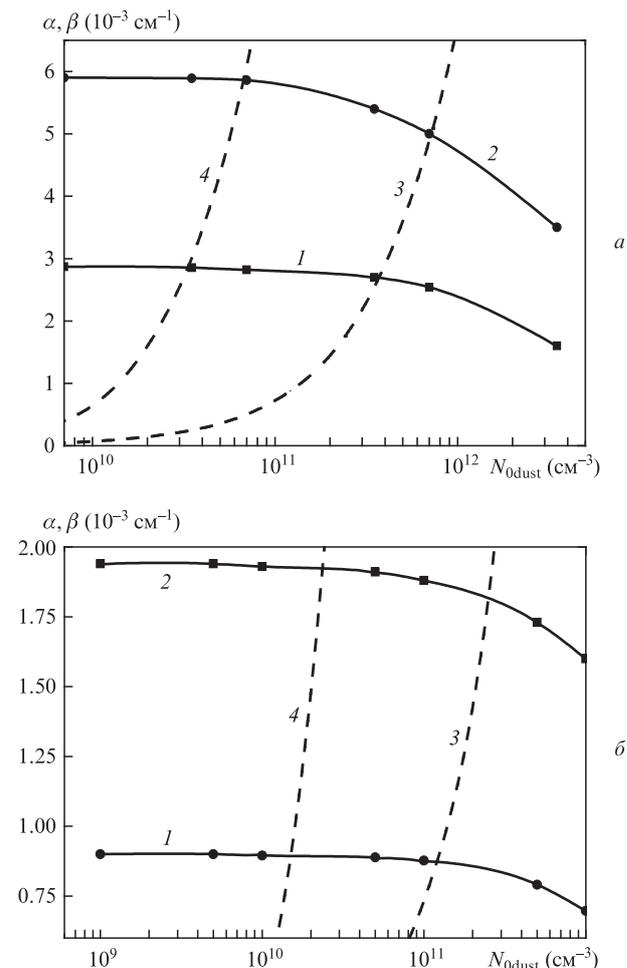


Рис.3. Зависимости линейных коэффициентов усиления  $\alpha$  лазерного излучения газовой фазой He–Ar-среды на длине волны 1790 нм при удельных мощностях энерговыклада  $125$  (1) и  $250 \text{ Вт/см}^2$  (2), а также коэффициентов ослабления  $\beta$  излучения нанокластерами из  $\text{U}$  (3) и  $\text{UO}_2$  (4) от их концентрации при давлении смеси 3 (а) и 5 атм (б).

нанокластеров в результате их столкновения с ОД составляет не более 13% в зависимости от внешних условий: давления смеси и максимальной удельной мощности энерговыклада. При этом вклад в процесс разрушения молекулярных ионов аргона непосредственно разрушенными кластерами не превышает 1%.

Анализируя полученные результаты, можно утверждать, что в гелий-аргоновой среде, возбуждаемой ОД и

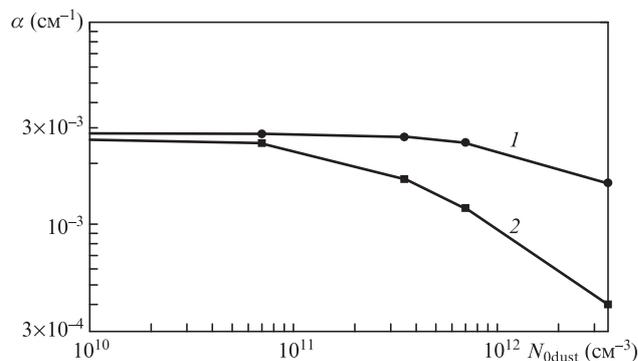


Рис.4. Линейные коэффициенты усиления, рассчитанные с помощью расширенной (1) и ранее разработанной (2) кинетических моделей при давлении смеси 3 атм и мощности энерговыклада  $125 \text{ Вт/см}^2$ .

содержащей пылевые частицы из металлического урана или диоксида урана, возможно усиление слабого сигнала ЛИ на длине волны  $\lambda = 1790$  нм при характерных для ядерной накачки удельных мощностях энергоклада, что является одним из необходимых условий получения генерации.

#### 4. Заключение

Перечислим основные полученные нами результаты.

1. Разработана кинетическая модель He–Ar–ЯВП, содержащей нанокластеры соединений урана. Модель включает в себя 72 компонента и более 400 реакций. Учет разрушения нанокластеров при столкновении с ОД и поуровневой кинетики уровня Ag(3d) позволил уточнить линейные коэффициенты усиления слабого сигнала на длине волны 1790 нм в He–Ar–ЯВП, содержащей нанокластеры соединений урана в различной концентрации.

2. Результаты математического моделирования свидетельствуют о том, что при концентрациях не менее  $10^{11}$  см<sup>-3</sup> основное влияние нанокластеры оказывают на электроны, а также на молекулярные ионы гелия и аргона, изменяя их концентрации в несколько раз. В то же время при концентрациях нанокластеров менее  $10^{12}$  см<sup>-3</sup> линейные коэффициенты усиления слабого сигнала уменьшаются незначительно, что говорит о принципиальной возможности усиления в исследуемой среде.

3. Кинетический анализ среды показал, что доля кластеров, разрушенных в результате их столкновения с ОД, в рассматриваемой среде не превышает 13%.

4. Нанокластеры из металлического урана и диоксида урана размером 10 нм при концентрациях менее  $10^{12}$  см<sup>-3</sup> практически не ослабляют ЛИ на длине волны 1790 нм в He–Ar–ЯВП, и применение нанокластеров именно из этих материалов представляется наиболее перспективным.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 12-08-31319).

1. Miley G.H., McArthur D., DeYuong R., Prelas M. *Proc. Conf. «50 Years with Nuclear Fission»* (Washington: American Nuclear Society, 1989).
2. Будник А.П., Косарев В.А., Лунев В.П. *Препринт ФЭИ-3141* (Обнинск, 2011).
3. Budnik A.P., Deputatova L.V., Fortov V.E., Kosarev V.A., Rykov V.A., Vladimirov V.I. *Contrib. Plasma Phys.*, **49** (10), 765 (2010).
4. Будник А.П., Косарев В.А. [www.chemphys.edu.ru/media/files/2011-02-01-004\\_Budnik\\_Kosarev.pdf](http://www.chemphys.edu.ru/media/files/2011-02-01-004_Budnik_Kosarev.pdf).
5. Будник А.П., Лунев В.П. *Труды 3-й Всероссийской школы-семинара «Аэрофизика и физическая механика классических и квантовых систем»* (М.: ИПМех РАН, 2010, с. 196).
6. Бабичев Д.Н., Карелин А.В., Симакова О.В., Томизава Х. *Квантовая электроника*, **31** (3), 209 (2001).
7. Magda E.P., Grebyonkin K.F., Kryzhanovsky V.A. *Proc. Int. Conf. «Laser '90»* (San Diego, USA, 1990, p. 827).
8. Яковленко С.И., Карелин А.В. *Отчет ИОФ РАН* (М., 1995).
9. Григорьев И.С. *Физические величины* (М.: Энергоатомиздат, 1991).
10. Алхазов Г.Д. *ЖТФ*, **40**, 97 (1970).
11. Мельников С.П., Синянский А.А. *ЖТФ*, **62** (6), 159 (1992).
12. Hayashi M. *Report No. NIFS-DATA-72* (National Institute for Fusion Science, Japan, 2003).
13. Дятко Н.А., Кочетов И.В., Напартович А.П. *Физика плазмы*, **18** (7), 888 (1992).