

Кинетика кислородно-иодной активной среды с оптической накачкой атомов иода на переходе ${}^2P_{1/2} - {}^2P_{3/2}$

М.В.Загидуллин, М.С.Малышев, В.Н.Аязов

Проанализирована кинетика процессов в потоке газа $O_2-I_2-He-H_2O$, в котором последовательно осуществляются фотодиссоциация молекулярного иода на длине волны вблизи 500 нм и возбуждение атомарного иода на переходе ${}^2P_{1/2} - {}^2P_{3/2}$ узкополосным излучением вблизи 1315 нм. Показано, что таким способом можно сформировать кислородно-иодную среду с высокой степенью диссоциации молекулярного иода и относительным содержанием синглетного кислорода $O_2(a^1\Delta)$ более 10%. Сформировав из этой среды сверхзвуковой поток с температурой газа ~ 100 К, можно достичь усиления слабого сигнала около 10^{-2} см $^{-1}$ на переходе ${}^2P_{1/2} - {}^2P_{3/2}$ атома иода. В кислородно-иодном лазере с такой активной средой удельная мощность с единицы поперечного сечения потока может составить ~ 100 Вт/см 2 .

Ключевые слова: оптическая накачка, синглетный кислород, атом иода, кислородно-иодный лазер, диодный лазер.

1. Введение

В настоящее время проявляется интерес к созданию мощных газовых лазеров с накачкой излучением лазерных диодов. В качестве активных частиц предлагается использовать атомы щелочных металлов [1–5] или инертных газов [6, 7]. Рассматривается также кислородно-иодный лазер с оптической накачкой, в котором молекула кислорода возбуждается в состояние $a^1\Delta$ в результате передачи энергии от фотосенсибилизатора, например молекулы фуллерена [8]. В кислородно-иодном лазере инверсия на переходе ${}^2P_{1/2} - {}^2P_{3/2}$ атома иода образуется в результате резонансного обмена энергией с молекулой синглетного кислорода $O_2(a^1\Delta)$:



Здесь и далее I^* , I , $O_2(X)$, $O_2(a)$ и $O_2(b)$ – атомы иода в состояниях ${}^2P_{1/2}$, ${}^2P_{3/2}$ и молекулы кислорода в состояниях $X^3\Sigma$, $a^1\Delta$ и $b^1\Sigma$ соответственно. Ключевой характеристикой активной среды кислородно-иодного лазера является величина Y – отношение концентрации молекул кислорода в состоянии $a^1\Delta$ к суммарной концентрации кислорода в состояниях $a^1\Delta$ и $X^3\Sigma$. Инверсная населенность на переходе ${}^2P_{1/2} - {}^2P_{3/2}$ атома иода наступает при $Y > Y_{th}(T) = (2K_e + 1)^{-1}$, где $K_e(T) = 0.75 \exp(401/T)$ – константа равновесия реакции (1) при температуре T . Например, при $T = 300$ К пороговое значение $Y_{th} = 0.15$, а при $T = 100$ К оно равно 0.012. В кислородно-иодном лазере с химическим генератором синглетного кислорода Y обычно превышает 0.4, и

инверсная населенность образуется при комнатной температуре [9]. В электроразрядном кислородно-иодном лазере $Y \leq 0.15$. Поэтому для достижения инверсной населенности применяют газодинамическое охлаждение активной среды [10].

В настоящей работе рассматривается возможность создания кислородно-иодного лазера с оптической накачкой (КИЛОН), в котором передача энергии от возбужденных атомов иода к молекулам кислорода служит механизмом энергетической накачки среды O_2-I . Для получения активной среды КИЛОН поток газа, включающий атомы иода и молекулы кислорода в основных состояниях, облучается на частоте перехода ${}^2P_{1/2} - {}^2P_{3/2}$ атома иода. Излучение может быть некогерентным и разнонаправленным, например от массива диодных лазеров. Образующиеся возбужденные атомы иода передают энергию молекулам кислорода, переводя их в состояние $a^1\Delta$. С увеличением интенсивности излучения $Y \rightarrow Y_{th}(T_1)$, где T_1 – температура потока. Произведем резкое газодинамическое охлаждение потока до температуры $T_2 < T_1$, сохранив при этом достигнутое относительное содержание молекул $O_2(a)$. В результате охлаждения можно добиться выполнения неравенства $Y > Y_{th}(T_2)$. В этом случае на переходе ${}^2P_{1/2} - {}^2P_{3/2}$ атома иода образуется инверсия и возникает возможность лазерного эффекта. Для реализации такой схемы кислородно-иодного лазера необходимо, во-первых, с помощью оптического излучения наработать достаточную концентрацию атомов иода. Во-вторых, при таком способе оптической накачки скорость образования молекул $O_2(a)$ должна быть больше скорости их дезактивация. Цель данной работы – показать, что кинетика кислородно-иодной среды не препятствует принципиальной возможности создания КИЛОН.

2. Исходные уравнения, моделирующие кинетику кислородно-иодной среды с оптической накачкой

На рис. 1 представлена принципиальная схема КИЛОН. Поток газа $O_2-I_2-He-H_2O$ (без атомов иода) поступает

М.В.Загидуллин, В.Н.Аязов. Самарский филиал Физического института им. П.Н.Лебедева РАН, Россия, 443011 Самара, ул. Ново-Садовая, 221; Самарский государственный аэрокосмический университет им. акад. С.П.Королева, Россия, 443086 Самара, Московское ш., 34; e-mail: marsel@fian.smr.ru, azyazov@fian.smr.ru;
М.С.Малышев. Самарский государственный аэрокосмический университет им. акад. С.П.Королева, Россия, 443086 Самара, Московское ш., 34; e-mail: ningen256@fian.smr.ru

Поступила в редакцию 9 июля 2014 г., после доработки – 31 октября 2014 г.

в секцию 1, где он подвергается воздействию излучения сорта А на длине волны $\lambda_A \approx 500$ нм. Под действием этого излучения происходит фотодиссоциация молекул иода. Далее смесь поступает в секцию 2, где на нее воздействует излучение сорта В на длине волны $\lambda_B \approx 1315$ нм. Под действием этого излучения происходит возбуждение атомов иода в состоянии ${}^2P_{1/2}$.

С появлением возбужденных атомов иода стартуют энергообменные и дезактивационные процессы, представленные в табл. 1. Значения констант скоростей приведены для температуры 300 К, для которой они надежно установлены. Особенно важны для формирования активной среды КИЛОН процессы, приводящие к диссоциации молекулы иода в химических реакциях в секции 2. Как известно [11], в присутствии $O_2(a)$, $O_2(b)$ и I^* диссоциация иода

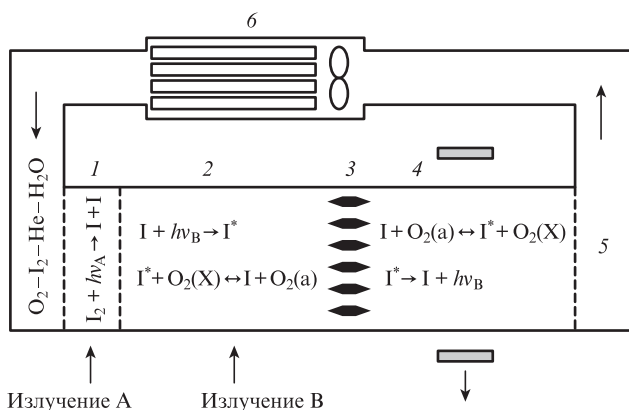


Рис. 1. Принципиальная схема КИЛОН:

1 – секция фотодиссоциации молекул иода; 2 – секция оптической накачки молекул кислорода; 3 – сопловая решетка; 4 – активная зона резонатора; 5 – диффузор; 6 – компрессор и теплообменник.

Табл. 1. Константы скоростей процессов в кислородно-йодной среде при температуре 300 К

Номер реак-ции	Реакция	Константы скоростей реакций
1	$O_2(a) + I \rightarrow O_2(X) + I^*$ $O_2(X) + I^* \rightarrow O_2(a) + I$	$k_{1f} = 7.6 \times 10^{-11}$ [12] $k_{1b} = k_{1f}/K_e, K_e = 2.85$
2	$I_2 + O_2(b) \rightarrow 2I + O_2(X)$	$k_2 = 10^{-10}$ [13]
3	$I^* + I_2 \rightarrow I + I_2^*$	$k_3 = 3.6 \times 10^{-11}$ [14]
4	$I_2^* + O_2(a) \rightarrow 2I + O_2(X)$	$k_4 = 3 \times 10^{-11}$ [15]
5a	$O_2(a) + I \rightarrow O_2(X) + I$	k_{5a}
5b	$O_2(X) + I^* \rightarrow O_2(X) + I$	$k_{5b}, K_5 = k_{5a} + K_e k_{5b} = 10^{-15}$ [16]
6a	$O_2(a) + I^* \rightarrow O_2(b) + I$	$k_{6a} = 2.1 \times 10^{-13}$ [17]
6b	$O_2(a) + I^* \rightarrow O_2(X) + I^*$	k_{6b}
6c	$O_2(a) + I^* \rightarrow O_2(a) + I$	k_{6c}
6d	$O_2(a) + I^* \rightarrow O_2(X) + I$	$k_{6d}, K_6 = k_{6a} + k_{6b} + k_{6c} + 2k_{6d} = 6 \times 10^{-13}$ [18]
7	$O_2(b) + H_2O \rightarrow O_2(a) + H_2O$	$k_7 = 6.7 \times 10^{-12}$ [19]
8	$I_2^* + M \rightarrow I_2 + M$	$k_8^M = 3 \times 10^{-10}$ (M = H ₂ O), 3×10^{-12} (M = O ₂), 10^{-14} (M = He)*,
9	$I^* + H_2O \rightarrow I + H_2O$	$k_9 = 2 \times 10^{-12}$ [14]
10	$I + I(I^*) + M \rightarrow I_2 + M$	$k_{10}^M = 3.8 \times 10^{-30}$ (M = I ₂) [20], 3.8×10^{-33} (M = He) [21], 1.2×10^{-32} (M = O ₂) [21],

*) принята равной k_8^{Ar} [15]; k_{10}^M измеряется в $cm^6 \cdot c^{-1}$.

протекает по сложному многоканальному механизму. Упрощенно процесс диссоциации иода можно описать феноменологической моделью Хайднера [15] с двумя каналами диссоциации. По одному из них молекула иода диссоциирует при столкновении с молекулой $O_2(b)$ (реакция 2). Молекулы $O_2(b)$ преимущественно образуются в реакции 6a. При высокой степени фотодиссоциации молекул иода ($\sim 10\%$) скорость образования молекул $O_2(b)$ в реакции «пуллинг» $O_2(a) + O_2(a) \rightarrow O_2(b) + O_2(X)$ с константой скорости $\sim 4 \times 10^{-17} cm^3/c$ [17] намного меньше, чем в реакции 6a. Поэтому влиянием реакции «пуллинг» на скорость образования молекул $O_2(b)$ можно пренебречь.

По второму каналу диссоциации иода протекает в два этапа. На первом этапе в реакции 3 образуется колебательно-возбужденная молекула иода I_2 ($v = 20-40$), обозначенная в табл. 1 как I_2^* . На втором этапе эта молекула диссоциирует в реакции 4. Вклад данного канала в скорость диссоциации I_2 растет с увеличением концентраций молекул $O_2(a)$ и атомов I^* в смеси. В реакциях 5, 6b–6d, 7 и 9 происходит тушение электронно-возбужденных частиц, а в реакциях 10 – рекомбинация атомов иода. Каскадная V–T-релаксация молекул иода с колебательных уровней с $v = 20-40$ на уровни с $v < 20$ описывается реакцией 8. Небольшая примесь воды обеспечивает переход молекул кислорода из состояния $b^1\Sigma$ в состояние $a^1\Delta$ в реакции 7.

Будем считать, что зоны воздействия излучений пространственно разделены: в секции 1 осуществляется только фотодиссоциация молекул иода, а в секции 2 происходит только оптическая накачка атомов иода. Полагаем, что секции 1 и 2 помещены в теплообменник, обеспечивающий постоянную температуру газового потока $T_1 \equiv 300$ К. По мере движения потока в секции 2 растет относительная концентрация молекул $O_2(a)$. Пройдя через сопловую решетку 3, поток приобретает сверхзвуковую скорость и втекает в резонатор 4. В ходе газодинамического расширения температура газа понижается и возникает инверсная населенность на переходе ${}^2P_{1/2} - {}^2P_{3/2}$ атома иода. В резонаторе 4 запасенная в смеси энергия преобразуется в лазерное излучение. Отработанная лазерная среда откачивается в атмосферу или повторно используется в замкнутом цикле, как показано на рис. 1.

В секции 1 зависимость полной концентрации атомов иода n_I от координаты по потоку z находится из решения уравнения

$$V_1 \frac{dn_I}{dz} = 2\Gamma_A n_{I_2} - 2K_{10} n_I^2 \quad (2)$$

с начальным условием $n_I(z=0) = 0$. Здесь $K_{10} = k_{10}^{O_2} N_{O_2} + k_{10}^{He} N_{He} + k_{10}^{I_2} n_{I_2}$; N_{O_2} , N_{He} , N_{I_2} – начальные концентрации O_2 , He и I_2 ; $n_{I_2} = N_{I_2} - 0.5n_I$ – концентрация молекул иода; V_1 – скорость потока в секциях 1 и 2; Γ_A – скорость фотодиссоциации молекул иода под действием излучения сорта А. Удельную энергию E_A , поглощенную единицей объема потока, найдем из уравнения

$$V_1 \frac{dE_A}{dz} = \varepsilon_A \Gamma_A n_{I_2}, \quad (3)$$

где $\varepsilon_A \approx 4 \times 10^{-19}$ Дж – энергия фотона с длиной волны $\lambda \approx 500$ нм.

В секции 2 изменения концентраций компонент вдоль потока описываются следующими скоростными уравнениями:

$$V_1 \frac{dn_1}{dz} = 2k_2 n_b n_{I_2} + 2k_4 n_{I_2}^* n_a - 2K_{10} n_1^2, \quad (4)$$

$$V_1 \frac{dn_1^*}{dz} = -\Gamma_B g + k_{1f} n_a n_1 - \Gamma_1^* n_1^*, \quad (5)$$

$$V_1 \frac{dn_a}{dz} = -\Gamma_a n_a + k_{1b} n_X n_1^* + k_7 n_b N_{H_2O}, \quad (6)$$

$$V_1 \frac{dn_b}{dz} = k_{6a} n_a n_1^* - \Gamma_b n_b, \quad (7)$$

$$V_1 \frac{dn_{I_2}^*}{dz} = k_3 n_{I_2} n_1^* - \Gamma_{I_2}^* n_{I_2}^*, \quad (8)$$

где

$$\Gamma_1^* = (k_{1b} + k_{5b}) n_X + (k_{1f} + k_{6a} + k_{6c} + k_{6d}) n_a + k_3 n_{I_2} + k_9 N_{H_2O};$$

$$\Gamma_b = k_7 N_{H_2O} + k_2 n_{I_2};$$

$$\Gamma_{I_2}^* = k_4 n_a + k_8^{O_2} N_{O_2} + k_8^{He} N_{He} + k_8^{H_2O} N_{H_2O};$$

$$\Gamma_a = (k_{1f} + k_{5a}) n_1 + (k_{6a} + k_{6b} + k_{6d} - k_{1f} - k_{5a}) n_1^* + k_4 n_{I_2}^*.$$

В этих уравнениях n_X , n_a , n_b – текущие значения концентрации кислорода в состояниях $X^3\Sigma$, $a^1\Delta$, $b^1\Sigma$; n_1^* – концентрация атомов иода в состоянии $^2P_{1/2}$; $n_{I_2}^*$ – суммарная концентрация молекул иода в колебательно-возбужденных состояниях с $v = 20-40$; $g = 1.5n_1^* - 0.5n_1$ – плотность инверсии на переходе $^2P_{1/2} - ^2P_{3/2}$ атома иода. Остальные обозначения в уравнениях (2)–(8) приведены в табл.1, 2.

3. Результаты расчетов

Численные расчеты были проведены для широкого диапазона составов газовой смеси, параметров потока и оптической накачки. В табл.2 приведены близкие к оптимальным значения параметров кислородно-иодного потока и оптической накачки, для которых будет рассмотрен процесс формирования активной среды КИЛОН. Выбор температуры среды (300 К) диктовался только надежностью значений констант скоростей при этой температуре, что делает результаты расчетов достоверными.

Табл.2. Параметры кислородно-иодной среды состава $O_2:I_2:He:H_2O = 100:2:500:1$ и оптической накачки.

Параметры	Значения параметров
Температура потока (T_1)	300 К
Давление (p_1)	74.5 мм рт. ст.
Концентрация кислорода (N_{O_2})	4×10^{17} см $^{-3}$
Концентрация молекул йода ($N_{O_2} = 0.02 N_{O_2}$)	8×10^{15} см $^{-3}$
Концентрация молекул воды ($N_{H_2O} = 0.01 N_{O_2}$)	4×10^{15} см $^{-3}$
Концентрация атомов гелия ($N_{He} = 5N_{O_2}$)	2×10^{18} см $^{-3}$
Скорость потока в секциях 1 и 2 (V_1) (число Маха M_1)	300 м/с (0.45)
Длина секции 1 (z_A)	10 см
Длина секции 2 (z_B)	12 см
Скорость фотодиссоциации молекул иода (Γ_A)	500 с $^{-1}$
Вероятность вынужденных переходов между состояниями $^2P_{1/2}$ и $^2P_{3/2}$ в атоме иода (Γ_B)	2×10^5 с $^{-1}$

Из численного решения уравнения (1) следует, что на расстоянии $z_A = 10$ см от точки начала облучения светом сорта А достигается концентрация атомов иода $n_{IA} = 2.4 \times 10^{15}$ см $^{-3}$ (продиссоциировало примерно 14% молекул иода). При этом в единице объема поглощается энергия излучения $E_A \approx 0.5$ мДж/см 3 .

Рассмотрим теперь изменение концентраций компонентов в секции 2. Упростим систему уравнений (4)–(8) до системы из двух уравнений для концентрации атомов иода и относительного содержания Y . В рассматриваемой газовой смеси выполняются неравенства $\Gamma_1^* > 10^7$ с $^{-1}$, $\Gamma_b > 4 \times 10^4$ с $^{-1}$ и $\Gamma_{I_2}^* > 10^6$ с $^{-1}$. Соответствующие этим частотам времена, как будет видно далее, значительно меньше характерных времен, за которые существенно изменяются концентрации атомов иода и синглетного кислорода. Поэтому, положив $dn_1^*/dz \approx 0$, $dn_b/dz \approx 0$ и $dn_{I_2}^*/dz \approx 0$, получим следующие квазистационарные приближения для концентраций компонентов и плотности инверсии:

$$n_1^* = n_1 \left[\frac{k_{1f} n_a + 0.5\Gamma_B}{1.5\Gamma_B + \Gamma_1^*} \right], \quad g = 0.5n_1 \frac{3k_{1f} n_a - \Gamma_1^*}{1.5\Gamma_B + \Gamma_1^*}, \quad (9)$$

$$n_b \approx \frac{k_{6a} n_a n_1 \left[\frac{k_{1f} n_a + 0.5\Gamma_B}{1.5\Gamma_B + \Gamma_1^*} \right]}{\Gamma_b}, \quad n_{I_2}^* = \frac{k_3 n_{I_2} n_1 \left[\frac{k_{1f} n_a + 0.5\Gamma_B}{1.5\Gamma_B + \Gamma_1^*} \right]}{\Gamma_{I_2}^*}. \quad (10)$$

В рассматриваемых условиях выполняется неравенство $n_b \ll N_{O_2}$, поэтому $N_{O_2} \approx n_a + n_X$ и $Y \approx n_a/N_{O_2}$. Подставим (9) и (10) в уравнения (4) и (6). Учитывая, что $\Gamma_b \ll \Gamma_1^*$ и $\Gamma_1^*/(k_{1f} n_a + k_{1b} n_X) \approx 1$, получаем уравнения для концентрации атомов иода,

$$V_1 \frac{dn_1}{dz} = 2n_1 n_{I_2} Y \times \left\{ \frac{k_{1f} Y N_{O_2} + 0.5\Gamma_B}{k_{1b} [(K_c - 1)Y + 1]} \left[\frac{k_2 k_{6a}}{\Gamma_b} + \frac{k_4 k_3}{\Gamma_{I_2}^*} \right] - (2K_{10} - k_{10}^2 n_1) n_1^2 \right\}, \quad (11)$$

и для относительного содержания молекул $O_2(a)$:

$$V_1 \frac{dY}{dz} = -\frac{0.5n_1}{N_{O_2}} \frac{\Gamma_B}{(K_c - 1)Y + 1} \left\{ [(2K_c + 1)Y - 1] + \frac{2YK_c \Gamma_Y}{\Gamma_B} \right\}, \quad (12)$$

где

$$K_c = K_c(T_1); \quad \Gamma_Y = \frac{(1-Y)K_5 N_{O_2}}{K_c} + YK_6 N_{O_2} + k_9 N_{H_2O} + n_{I_2} \left(k_3 + \frac{N_{O_2} Y k_4 k_3}{\Gamma_{I_2}^*} + \frac{N_{O_2} Y k_2 k_{6a}}{\Gamma_b} \right).$$

Энергия излучения сорта В, поглощенная в единице объема потока, находится из решения уравнения

$$V_1 \frac{dE_B}{dz} = -\Gamma_B \epsilon_B g, \quad (13)$$

где $\epsilon_B = 1.51 \times 10^{-19}$ Дж – энергия фотона с длиной волны $\lambda = 1315$ нм. Начальные условия для уравнений (11), (12) и (13) соответственно таковы: $n_{IA} = 2.4 \times 10^{15}$ см $^{-3}$, $Y = 0$, $E_B = 0$.

Рассмотрим стационарные решения уравнений (11) и (12). В нулевом приближении, пренебрегая дезактивацией возбужденных частиц ($\Gamma_Y = 0$) и рекомбинацией атомов иода ($K_{10} = 0$, $k_{10}^2 = 0$), получим стационарные значения $Y_{th} = (2K_c + 1)^{-1} = 0.15$ для относительного содержания

$O_2(a)$ и $n_1 = 2N_{I_2}$ для концентрации атомов иода. Величина $(2K_c + 1)^{-1} = 0.15$ равна предельно достижимому относительному содержанию $O_2(a)$. Приравняв правую часть уравнения (12) нулю и считая, что $\Gamma_Y = (1 - Y_{th})K_5N_{O_2}/K_c + Y_{sl}K_6N_{O_2} + k_9N_{H_2O}$, получим стационарное значение для относительного содержания синглетного кислорода в первом приближении:

$$Y_s = \frac{1}{2K_c + 1} \left(1 + \frac{2K_c \Gamma_Y}{\Gamma_B(2K_c + 1)} \right)^{-1}. \quad (14)$$

Найдем значение Y_s для условий, приведенных в табл.2. Для рассматриваемой газовой смеси $\Gamma_Y \approx Y_{th}K_6N_{O_2}$. Константа скорости K_6 определена с большим разбросом (от $2.2 \times 10^{-13} \text{ см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$ [16] до $6 \times 10^{-13} \text{ см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$ [18]). При $K_6 = 6 \times 10^{-13} \text{ см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$ и $\Gamma_B \approx 2 \times 10^5 \text{ с}^{-1}$, указанных в табл.1, можно достичь $Y_s \approx 0.13$. Если же $K_6 = 2.2 \times 10^{-13} \text{ см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$, то этого же значения Y_s можно достичь при $\Gamma_B \approx 7 \times 10^4 \text{ с}^{-1}$.

Оценим стационарное значение доли молекулярного иода с учетом того, что рекомбинация атомов иода происходит преимущественно на молекулах кислорода и атомах гелия. Приравняв правую часть (11) нулю и полагая $Y = Y_{th}$, получим стационарное значение доли недиссоциированного иода:

$$\frac{n_{I_2}}{N_{I_2}} = 4(k_{10}^{O_2}N_{O_2} + k_{10}^{He}N_{He}) \frac{(K_c - 1)Y_{th} + 1}{Y_{th}^2 K_c N_{O_2}} \left[\frac{k_2 k_{6a}}{\Gamma_b} + \frac{k_4 k_3}{\Gamma_{I_2}^*} \right]^{-1}.$$

Отсюда находим, что для рассматриваемой газовой смеси $n_{I_2}/N_{I_2} \ll 1$. Таким образом, при достаточной длине секции 2 можно получить относительное содержание молекул $O_2(a)$, близкое к $Y_s(T_1)$, и высокую степень диссоциации иода.

Зависимости Y , n_1 и g от координаты вдоль по потоку, полученные численным решением уравнений (11) и (12), представлены на рис.2. Видно, что $Y = 0.125$, близкое к значению Y_s , достигается на расстоянии ~ 12 см, а иод полностью диссоциирует на расстоянии 8 см от начала облучения потока излучением сорта В. Сопловую решетку 3, очевидно, целесообразно расположить на расстоянии $z = 12$ см, где $Y \approx Y_s$. Из решения (13) следует, что за время пребывания газа в секции 2 в единице объема поглотится энергия излучения $E_B = 17.5 \text{ мДж/см}^3$.

В качестве примера рассмотрим формирование активной среды КИЛОН сопловой решеткой с одинаковыми размерами дозвуковой и сверхзвуковой частей (1 см)

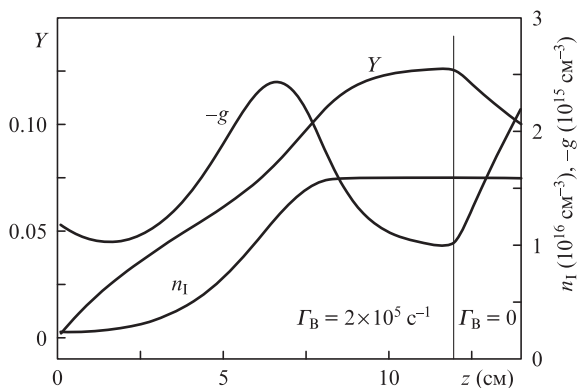


Рис.2. Изменение концентрации атомов иода, плотности инверсной населенности на переходе ${}^2P_{1/2}-{}^2P_{3/2}$ и относительного содержания $O_2(a)$ вдоль по потоку, начиная с момента его облучения на длине волны 1315 нм.

вдоль по потоку. В первую очередь оценим потери энергии в дозвуковой области сопловой решетки, где отсутствует оптическая накачка. На рис.2 показаны расчетные зависимости Y , n_1 и g для координаты по потоку $z \geq 12$ см при $\Gamma_B = 0$ и постоянной скорости потока V_1 . Как видно из рис.2, к концу дозвуковой части сопла доля молекул $O_2(a)$ уменьшится до $Y_0 \approx 0.11$, но поскольку в дозвуковой области скорость потока растет, доля молекул $O_2(a)$ будет больше.

Предположим теперь, что в расширяющейся части сопловой решетки потери полного давления и рост температуры торможения незначительны, т.е. режим течения близок к изэнтропическому, и на выходе сопловой решетки формируется сверхзвуковой поток с числом Маха $M_2 = 3$ и температурой торможения около 300 К. Согласно формулам газовой динамики [22] сверхзвуковой поток при этом будет иметь скорость $V_2 = 1100 \text{ м/с}$, температуру $T_2 = 86 \text{ К}$ и давление $p_2 = 2.65 \text{ мм рт. ст.}$, а площадь поперечного сечения потока в сверхзвуковой области будет в 2.23 раза больше, чем в секции 2. Концентрации атомов иода, гелия и молекул кислорода в сверхзвуковом потоке будут таковы: $n_I^s \approx 2 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $n_{He} \approx 2.5 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$ и $n_{O_2} \approx 5 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$.

Время пребывания газовой смеси в расширяющейся части сопловой решетки $\tau_{res} \approx 10^{-5} \text{ с}$. Прирост температуры потока за это время, обусловленный релаксацией запасенной энергии в наиболее быстрых реакциях ба–6d, составит $\Delta T^* \approx \varepsilon_{\Delta T_{res}} Y_0 n_{O_2} n_I^s K_6 / [(2.5n_{He} + 3.5n_{O_2})/k_B] \approx 10 \text{ К}$ ($\varepsilon_{\Delta T} = 1.56 \times 10^{-19} \text{ Дж/молек}$ – энергия возбуждения молекулы $O_2(a)$; k_B – постоянная Больцмана), что значительно меньше ее исходного значения ($\sim 300 \text{ К}$). Наряду с предположением о малых потерях полного давления в соплах, это оправдывает применение расчетов параметров активной среды с использованием формул для изэнтропического течения с начальной температурой торможения 300 К.

Удельная максимальная лазерная мощность, которую можно получить с единицы площади поперечного сечения потока в резонаторе, $\varepsilon_B V_2 n_{O_2} (Y_0 - Y_{th}) \approx 86 \text{ Вт/см}^2$, где $Y_{th} = (2K_c(T_2) + 1)^{-1} \approx 0.005$. В этих условиях оптическая эффективность $\varepsilon_B N_{O_2} (Y_0 - Y_{th}) / (E_A + E_B) \approx 0.35$, где $E_A + E_B = 0.5 + 17.6 \text{ мДж/см}^3 = 18.1 \text{ мДж/см}^3$ – поглощенная световая энергия. В центре линии излучения на переходе ${}^2P_{1/2}(F=3) \rightarrow {}^2P_{3/2}(F=4)$ коэффициент усиления слабого сигнала

$$n_I^s \frac{7}{12} \sigma \frac{(K_c(T_2) + 0.5) \Delta Y_c}{(K_c(T_2) - 1) Y_0 + 1} \approx 2.5 \times 10^{-2} \text{ см}^{-1},$$

где $\sigma(\text{см}^2) = 2.3 \times 10^{-16} (T_2)^{-0.5}$ – сечение вынужденного излучения на этом переходе при доплеровском уширении.

4. Выводы

Целью настоящей работы не было нахождение наиболее оптимальных составов среды $O_2-I_2-He-H_2O$ и условий для работы КИЛОН. Исходные данные выбраны нами исключительно для демонстрации работоспособности оптического способа накачки кислородно-иодной среды. Например, выбор температуры среды (300 К) диктовался исключительно надежностью констант скоростей при этой температуре, что делает результаты расчетов достоверными. Нами показано, что последовательное облучение потока смеси $O_2-I_2-He-H_2O$ «сине-зеленым» ($\lambda = 500 \text{ нм}$) и ИК излучением ($\lambda = 1315 \text{ нм}$) позволяет достичь

высокой степени диссоциации молекул иода и доли синглетного кислорода, превышающей 10%. При газодинамическом охлаждении полученной смеси формируется активная среда с инверсной населенностью. В рабочей среде не образуются побочных продуктов, и после рекомбинации атомов иода ее состав восстанавливается до первоначального. При рециркуляции рабочей смеси возможна адсорбция молекул иода на рабочих поверхностях газопроточного тракта, однако использование специальных покрытий поверхностей и подбор их температур позволяют минимизировать этот эффект.

Найдем интенсивности излучений, обеспечивающие рассмотренные в работе скорости оптической накачки. Молекулярный иод имеет широкую полосу фотодиссоциации в сине-зеленой области спектра. В области длин волн 500 ± 20 нм сечение поглощения молекул иода $\sigma_A \approx 3 \times 10^{-18}$ см², а квантовый выход фотодиссоциации при давлениях несколько десятков мм рт.ст. равен единице [23, 24]. Скорость фотодиссоциации молекул иода $\Gamma_A = 500$ с⁻¹ будет достигаться при интенсивности излучения $J_A = \varepsilon_A \Gamma_A / \sigma_A = 66$ Вт/см². Для поглощения 95% излучения потребуется оптическая длина $3/(\sigma_A N_{I_2}) \approx 300$ см. При $J_A = 660$ Вт/см² ($\Gamma_A = 5000$ с⁻¹) на выходе секции 1 можно достичь степени диссоциации иода примерно 87% и $n_{I_0} = 1.4 \times 10^{16}$ см⁻³. Из расчетов следует, что в этом случае оптическая эффективность КИЛОН при $\Gamma_B = 2 \times 10^5$ с⁻¹ может быть доведена до 60%, что сравнимо с эффективностью лазеров на парах щелочных металлов [3].

В спектре поглощения атома иода вблизи 1315 нм имеются шесть линий. При параметрах потока, указанных в табл.2, спектральная ширина каждой линии составляет ~400 МГц, и они практически не перекрываются. В центре сильнейшей линии $^2P_{1/2}(F=3) \leftarrow ^2P_{3/2}(F=4)$ сечение поглощения $\sigma_B \approx 3.5 \times 10^{-18}$ см². Вероятность вынужденных переходов $\Gamma_B = 2 \times 10^5$ с⁻¹ будет достигаться при $J_B = \varepsilon_B \Gamma_B / \sigma_B = 8.6$ кВт/см². Такой же порядок величины для интенсивности накачки требуется в лазерах на парах щелочных металлов [25]. Для излучения сорта В коэффициент поглощения $\alpha = \sigma_B(-g) \approx (3.5 \times 10^{-18} \text{ см}^2)(2 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}) = 7 \times 10^{-3}$ см⁻¹. Для поглощения 95% энергии излучения потребуется оптическая длина $3/\alpha \approx 450$ см. При поперечных размерах секций 1 и 2 около 1 м такая степень поглощения излучения будет достигаться при трех- и четырехкратном проходе. Спектральную ширину полосы поглощения излучения сорта В можно до определенной степени увеличивать, разбавляя смесь большим количеством буферного газа. Уширить спектр поглощения можно также за счет зеemannовского расщепления линий атома иода, прикладывая магнитное поле к активной среде в секции 2 [26]. Однако в обоих случаях это приводит к уменьшению коэффициента поглощения излучения сорта В.

Вопрос о том, возможно ли в принципе, надеясь на прогресс в развитии матриц диодных лазеров, обеспечить необходимые интенсивности излучения в сине-зеленой области спектра и на длине волны 1315 нм, оставлен в данной работе открытым.

Работы в СГАУ поддержаны Минобрнауки РФ в рамках Государственного задания вузам в сфере организации и проведения научных исследований (№ 3.161.2014/К, 1358); работы в СФ ФИАН поддержаны РФФИ (грант № 14-05-97013).

1. Krupke W.F. *Progr. Quantum Electron.*, **36**, 4 (2012).
2. Zhdanov B.V., Knize R.J. *Opt. Eng.*, **52**, 021010 (2013).
3. Богачев А.В., Гаранин С.Г., Дудов А.М., Ерошенко В.А., Куликов С.М., Микаелян Г.Т., Панарин В.А., Паутов В.О., Рус А.В., Сухарев С.А. *Квантовая электроника*, **42**, 95 (2012).
4. Шалагин А.М. *УФН*, **181**, 1011 (2011).
5. Barmashenko B. D., Rosenwaks S. *Appl. Phys. Lett.*, **102**, 141108 (2013).
6. Han J., Heaven M.C. *Opt. Lett.*, **37**, 2157 (2012).
7. Demyanov A.V., Kochetov I.V., Mikheyev P.A. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **46**, 375202 (2013).
8. Mak A., Belousova I.M., Kiselev V.M., Grenishin A.S., Danilov O.B., Sosnov E.N. *J. Opt. Technol.*, **76**, 172 (2009).
9. Benard D.J., McDermott W.E., Pchelkin N.R., Bousek R.R. *Appl. Phys. Lett.*, **34**, 40 (1979).
10. Benavides G.F., Woodard B.S., Zimmerman J.W., Palla A.D., Day M.T., King D.M., Carroll D.L., Verdeyen J.T., Solomon W.C. *IEEE J. Quantum Electron.*, **48**, 741 (2012).
11. Azyazov V.N., Pichugin S.Yu., Heaven M.C. *J. Chem. Phys.*, **130**, 104306 (2009).
12. Derwent R.G., Thrush B.A. *Far. Discuss. Chem. Soc.*, **53**, 162 (1972).
13. Zagidullin M.V., Khvatov N.A., Malyshev M.S., Svistun M.I. *J. Phys. Chem. A*, **116**, 10050 (2012).
14. Burde D.H., McFarlane R.A. *J. Chem. Phys.*, **64**, 1850 (1976).
15. Heidner R.F., Gardner C.E., Segal G.I., El-Sayed T.M. *J. Phys. Chem.*, **87**, 2348 (1983).
16. Heidner R.F. *J. Photochem.*, **25**, 449 (1984).
17. Загидуллин М.В., Хватов Н.А., Мальшев М.С. *Химическая физика*, **30**, 3 (2011).
18. Загидуллин М.В., Хватов Н.А., Свистун М.И., Мальшев М.С. *Химическая физика*, **32**, 3 (2013).
19. Aviles R.G., Muller D.F., Houston P.L. *Appl. Phys. Lett.*, **37**, 358 (1980).
20. Blake J.A., Burnes G. *J. Chem. Phys.*, **54**, 1480 (1971).
21. Ip J.K.K., Burns G. *J. Chem. Phys.*, **56**, 3155 (1972).
22. Абрамович Г.Н. *Прикладная газовая динамика* (М.: Наука, 1976, с. 29).
23. Saiz-Lopez A., Saunders R.W., Joseph D.M., Ashworth S.H., Plane J.M.C. *Atmos. Chem. Phys. Discuss.*, **4**, 2379 (2004).
24. Brewer L., Tellinghuisen J. *J. Chem. Phys.*, **56**, 3929 (1972).
25. Yang Z., Wang H., Lu O., Li Y., Hua W., Xu X., Chen J. *J. Opt. Soc. Am. B*, **28**, 1353 (2011).
26. Белоусова И.М., Бобров Б.Д., Киселев В.М., Курзенков В.Н., Крепостнов П.И. *Оптика и спектроскопия*, **37**, 38 (1974).