

Численное моделирование электроионизационного и проточного электроразрядного СО-лазеров

Ш.Ф.Арасланов*, Р.К.Сафиуллин**

Развит эффективный метод численного исследования проточных электроразрядных и электроионизационных СО-лазеров. Используемая модель включает в себя уравнения колебательной кинетики, уравнение для функции распределения электронов по энергиям и уравнения радиационной газовой динамики. Предложенный метод основан на разделении системы уравнений на несколько подсистем, относящихся к различным физическим процессам (метод расщепления). Выполнены расчеты населенностей колебательных уровней, коэффициентов усиления, интенсивностей линий излучения, выходной мощности и КПД СО-лазеров, проведено их сравнение с экспериментом.

Ключевые слова: СО-лазер, колебательные уровни, коэффициент усиления, спектр генерации.

1. Введение

Развитие эффективных численных методов, адекватно описывающих основные процессы в СО-лазерах направлено на поиск оптимальных режимов их работы. Эта задача не утратила своей актуальности до настоящего времени. Описываемая ниже математическая модель проточного электроразрядного СО-лазера включает в себя уравнения поуровневой колебательной кинетики для молекул СО и N₂, уравнение для функции распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ), уравнения газодинамики и уравнения для интенсивностей линий излучения СО-лазера. Она является развитием модели, предложенной в [1]. Помимо одноквантовых переходов в молекулах СО здесь могут учитываться также двухквантовые и многоквантовые переходы. Разработанная программа позволяет рассчитывать населенности колебательных уровней молекул СО и N₂, коэффициенты усиления и интенсивности линий генерации, выходную мощность и КПД СО-лазера. Сложная система дифференциальных уравнений решается методом разделения ее на несколько подсистем, описывающих различные физические процессы (метод расщепления).

2. Уравнения колебательной кинетики

Для описания колебательных уровней $E_n^{(1)}$ и $E_n^{(2)}$ молекул СО и N₂ используется модель ангармонического осциллятора Морзе:

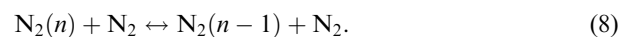
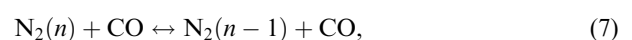
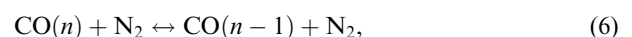
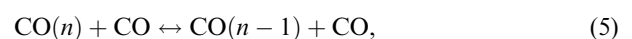
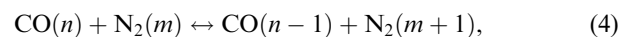
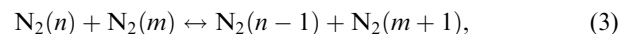
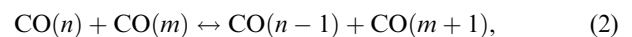
$$E_n^{(j)} = E_1^{(j)} n - \Delta E^{(j)} n(n-1), \quad j = 1, 2, \quad n = 0, 1, \dots,$$

$$E_1^{(1)} = 3084 \text{ К}, \quad \Delta E^{(1)} = 18.7 \text{ К}, \quad E_1^{(2)} = 3353 \text{ К}, \quad (1)$$

$$\Delta E^{(2)} = 21.1 \text{ К}.$$

Значение $n = 0$ соответствует здесь нулевому (основному) колебательному уровню основного электронного состояния молекул СО и N₂. В расчетах учитывалось до 60 колебательных уровней СО и до 50 колебательных уровней N₂.

В лазерной смеси СО–N₂ учитывались следующие процессы колебательно-колебательного (VV) и колебательно-поступательного (VT) обмена:



Рассматривались также лазерные смеси СО–He и СО–Ar.

Удобно ввести нормированные функции распределения молекул СО и N₂ по колебательным уровням:

$$f_n = \frac{N_n^{(1)}}{N^{(1)}}, \quad g_n = \frac{N_n^{(2)}}{N^{(2)}}, \quad (9)$$

где $N^{(1)}$ и $N^{(2)}$ – полные плотности молекул СО и N₂ соответственно. Тогда колебательная релаксация в смеси СО–N₂ с учетом индуцированного излучения будет описываться следующей системой дифференциальных уравнений:

$$\frac{df_n}{dt} = F_n + \left(\frac{\alpha_{n+1} I_{n+1}}{\Delta_n} - \frac{\alpha_n I_n}{\Delta_{n-1}} \right) \frac{T}{\xi_{1P}} = F_n + \varphi_n, \quad (10)$$

*НИИ математики и механики им. Н.Г.Чеботарева при Казанском государственном университете, Россия, 420008 Казань, Университетская ул., 17; e-mail: ashamil@ksu.ru

**Казанская государственная архитектурно-строительная академия, Россия, 420043 Казань, Зеленая ул., 1; e-mail: sladkov@ksaba.ru

$$n = 0, 1, \dots, v_1,$$

$$\frac{dg_n}{dt} = G_n, \quad n = 0, 1, \dots, v_2. \quad (11)$$

Здесь F_n и G_n описывают процессы VV- и VT-обмена (F_n учитывает также спонтанное излучение с возбужденных колебательных уровней СО); T и p – абсолютная температура и давление газовой смеси; ξ_1 и ξ_2 – молярные доли СО и N₂; I_n и α_n – интенсивность и коэффициент усиления для линии излучения $n \rightarrow n-1$ молекулы СО; $A_n = E_{n+1}^{(1)} - E_n^{(1)}$. Выражения для величин F_n и G_n приведены в [2–4].

Если принимается во внимание перекрытие линий излучения, то член φ_n в уравнении (10) заменяется на выражение, приведенное в работе [4].

3. Уравнения газовой динамики

Одномерное колебательно-неравновесное течение вязкой газовой смеси СО–N₂ (СО–He, СО–Ar) в плоском канале переменного сечения описывалось уравнениями

$$\rho u S = G = \text{const}, \quad (12)$$

$$\rho u \frac{du}{dx} + \frac{dp}{dx} = 0, \quad (13)$$

$$\rho u \frac{d}{dx} \left(c_p T + \frac{u^2}{2} + e_{\text{vib}} \right) = \delta W - \sum_{v=1}^{v_1} \xi_1 \rho R E_v^{(1)} A_{v,v-1} f_v - \sum_{v=1}^{v_1} \alpha_v I_v \equiv \psi, \quad (14)$$

$$e_{\text{vib}} = R \left(\xi_1 \sum_{v=1}^{v_1} E_v^{(1)} f_n + \xi_2 \sum_{v=1}^{v_2} E_v^{(2)} g_v \right), \quad (15)$$

$$p = \rho RT. \quad (16)$$

Здесь x – координата вдоль потока; ρ – плотность газа; u – его скорость; $R = R_0/\mu$ – газовая постоянная; R_0 – универсальная газовая постоянная; μ – молярный вес смеси; $S = HL$ – площадь поперечного сечения канала; H – высота канала; L – поперечный размер канала; G – массовый расход смеси через сечение канала за единицу времени; c_p – поступательно-вращательная удельная теплоемкость газа при постоянном давлении ($c_p = 3.5R$ для смеси СО–N₂); $\delta = \delta_{\text{el}} + \delta_{\text{rot}} + \delta_{\text{vib}}$ – доля удельной мощности W , идущая в поступательные, вращательные и колебательные степени свободы молекул; e_{vib} – удельная колебательная энергия.

4. Уравнения для интенсивностей линий излучения

Выходная мощность излучения электроразрядного СО-лазера с резонатором Фабри–Перо рассчитывалась в приближении постоянного коэффициента усиления. В рамках этой модели предполагается, что при наличии излучения на каком-либо колебательно-вращательном переходе $(n, j) \rightarrow (n-1, j+1)$ в каждом сечении резонатора СО-лазера выполняется условие [4]

$$\begin{aligned} \alpha_{nj}^{lP} &= \alpha_{nj}^P + \sum_{k,m} (\alpha_{mk}^R \gamma_{njmk}^{PR} + \alpha_{mk}^P \gamma_{njmk}^{PP}) \\ &= \alpha^* \equiv - \frac{\ln[(1-a)(1-a-\theta)]}{2L}, \end{aligned} \quad (17)$$

где α_{nj}^{lP} и α_{nj}^P – коэффициенты усиления для P -перехода $(n, j) \rightarrow (n-1, j+1)$ в СО с учетом и без учета перекрытия линий соответственно; α^* – пороговый коэффициент усиления; L – расстояние между зеркалами; a – коэффициент поглощения зеркал; θ – коэффициент пропускания выходного зеркала. При этом считается, что для заданного колебательного перехода $n \rightarrow n-1$ генерация происходит при изменении вращательного квантового числа $j_n \rightarrow j_n+1$, соответствующего максимуму коэффициента усиления. В предположении о равновесном распределении молекул СО по вращательным уровням коэффициент α_{nj}^P рассчитывается по формуле, приведенной в работе [5]. Факторы перекрытия линий γ_{njmk}^{PR} , γ_{njmk}^{PP} описаны в [4] и вычисляются с использованием констант линий, приведенных в [6–9].

Уравнения для неизвестных интенсивностей I_n получаются дифференцированием (17) и приравниванием полученного выражения к нулю (с учетом уравнений колебательной кинетики).

Если перекрытие линий несущественно, получается трехдиагональная система алгебраических уравнений [10]:

$$A_n I_{n+1} - B_n I_n + C_n I_{n-1} + D_n = 0, \quad n = l+1, \dots, m. \quad (18)$$

При выводе уравнения (18) были опущены члены, содержащие dp/dx и dT/dx . В практических вычислениях коэффициенты усиления в формулах для расчета коэффициентов A_n , B_n , C_n можно заменить на α^* . Для решения системы уравнений (18) используется метод скалярной прогонки. При этом полагается, что $I_l = 0$, $I_{m+1} = 0$. В расчетной программе натуральные числа l и m определяются в ходе вычислений.

Следует отметить, что интенсивности линий излучения можно рассчитывать с использованием более экономичной по времени и более простой методики, пригодной для расчета как без учета, так и с учетом перекрытия линий. При этом применяются следующие итерационные формулы, связывающие интенсивности и коэффициенты усиления для проточного СО-лазера:

$$I_n^{(l)}(x + \Delta x) = I_n^{(l-1)}(x + \Delta x) \exp \left[\frac{\alpha_{nj}^{(l)}(x + \Delta x)}{\alpha^*} - 1 \right]. \quad (19)$$

Здесь l – номер итерации; Δx – шаг расчета. В качестве начального приближения можно взять значения интенсивностей в предыдущем узле.

5. Уравнение Больцмана для ФРЭЭ

Для расчета распределения электронов по энергии U было использовано разложение ФРЭЭ по полиномам Лежандра. Уравнение Больцмана для сферически-симметричной компоненты ФРЭЭ записывалось в виде [11, 12]

$$\frac{1}{3} \left(\frac{E}{N} \right)^2 \frac{d}{dU} \left[U \frac{df}{dU} \left(\sum_k \xi_k Q_k^{\text{el}} \right)^{-1} \right] + \frac{kT}{e} \frac{d}{dU} \times$$

$$\begin{aligned} & \times \left\{ 2U \frac{df}{dU} \sum_k \xi_k \left[U Q_k^{\text{el}}(U) \frac{m}{M_k} + 3B_k Q_k^{\text{rot}}(U) \right] \right\} \\ & + \frac{d}{dU} \left\{ 2U f(U) \sum_k \xi_k \left[U Q_k^{\text{el}}(U) \frac{m}{M_k} + 3B_k Q_k^{\text{rot}}(U) \right] \right\} \\ & + \sum_{kms} \xi_k \xi_{km} [(U + U_s) f(U + U_s) Q_s^{\text{in}}(U + U_s) \\ & - U f(U) Q_s^{\text{in}}(U)] + \sum_{kms} \xi_k \xi_{ks} \left(\frac{g_{km}}{g_{ks}} \right) [U f(U - U_s) Q_s^{\text{in}}(U) \\ & - (U + U_s) f(U) Q_s^{\text{in}}(U + U_s)] = 0. \end{aligned} \quad (20)$$

Здесь e , m – заряд и масса электрона; $\xi_k = N_k/N$; $N = \sum N_k$; $\xi_{km} = N_{km}/N$; N_{km} – число молекул k -го сорта на m -м уровне внутренней энергии; N – полное число атомов и молекул в единице объема; M_k – масса молекул k -го сорта; B_k , $Q_k^{\text{el}}(U)$, $Q_k^{\text{rot}}(U)$ – постоянная вращения, транспортное сечение упругого рассеяния электронов на k -й молекуле и сечение возбуждения вращательных степеней свободы k -й молекулы соответственно; U – энергия электронов; U_s – энергия, теряемая электроном при столкновении с молекулой k -го сорта, при котором молекула переходит с m -го на s -й уровень внутренней энергии; Q_s^{in} – сечение соответствующего процесса; g_{km} , g_{ks} – статистические веса уровней m и s соответственно. Последние две суммы в уравнении (20) описывают неупругие и сверхупругие столкновения электронов с молекулами.

На функцию $f(U)$ накладывается граничное условие $f(\infty) = 0$ и обычное условие нормировки

$$\int_0^\infty U^{1/2} f(U) dU = 1. \quad (21)$$

Уравнение (20) решалось нами на конечном интервале $(0, U_n)$. При $U \geq U_n$ полагалось, что $f(U) = 0$. Уравнение (20) аппроксимировалось системой линейных алгебраических уравнений на сетке U_i ($i = 1 \div n$) с переменным шагом h_U . С точностью до постоянного множителя (который зависит от выбранного интервала интегрирования) использовалось следующее разбиение области интегрирования: $h_U = 0.01$ В, $0 < U < 0.5$ В; $h_U = 0.05$ В, $0.5 < U < 5$ В; $h_U = 0.20$ В, $5 < U < 15$ В. Такое расположение узлов сетки отражает экспоненциальный характер изменения ФРЭЭ и хорошо зарекомендовало себя на практике.

Если девозбуждение колебательных уровней не учитывается (т.е. рассматривается уравнение (20) без последней суммы), то система решается методом исключения неизвестных (полагается, что $f_{n-1} = 1$, и последовательно находятся f_{n-2} , f_{n-3} и т.д. до $f_1 \equiv f(0)$). Затем ФРЭЭ нормируется согласно формуле (21). При учете девозбуждения колебательных и электронных уровней система решается методом оптимального исключения [13], который оказывается заметно более эффективным, чем обычный метод Гаусса.

После нахождения нормализованной ФРЭЭ константы скоростей процессов с участием электронов вычисляются по формуле

$$K_{kms} = \left(\frac{2e}{m} \right)^{1/2} \int_0^\infty U Q_{kms}^{\text{in}}(U) f(U) dU. \quad (22)$$

Здесь K_{kms} – константа скорости возбуждения электронном уровне s молекулы k -го сорта, находящейся на уровне m (переход $m \rightarrow s$). Вычисляются также доли энергии электрического поля, идущие в неупругие (δ_{kms}), поступательные (δ_{el}), вращательные (δ_{rot}) и колебательные степени свободы молекул, а также на возбуждение электронных уровней и ионизацию атомов и молекул.

Константы скоростей обратных процессов рассчитываются по формуле

$$K'_{kms} = \left(\frac{2e}{m} \right)^{1/2} \int_{U_{kms}}^\infty U \left(\frac{g_{ks}}{g_{km}} \right) Q_{kms}(U) f(U - U_{kms}) dU. \quad (23)$$

Затем по известным формулам вычисляются доли энергии, идущие из неупругих (δ'_{kms}) и из поступательных (δ'_{el}) степеней свободы атомов и молекул, а также из вращательных степеней свободы молекул (δ'_{rot}).

Если умножить уравнение (20) на $U dU$ и проинтегрировать от 0 до ∞ , то получается уравнение баланса энергии электронов, которое можно записать в виде

$$\begin{aligned} & \delta_{\text{el}} + \delta_{\text{rot}} + \sum_{kms} \delta_{kms} \\ & - \left(1 + \delta'_{\text{el}} + \delta'_{\text{rot}} + \sum_{kms} \delta'_{kms} \right) = 0. \end{aligned} \quad (24)$$

При вычислениях это соотношение выполняется с некоторой погрешностью Δ . За относительную погрешность вычислений нами принималась величина

$$\varepsilon = \left| \Delta \left(\delta_{\text{el}} + \delta_{\text{rot}} + \sum_{kms} \delta_{kms} \right)^{-1} \right|. \quad (25)$$

В расчетах нами использовались сечения процессов рассеяния электронов на молекулах, приведенные в [11], где собраны результаты многих работ по экспериментальному и теоретическому определению сечений процессов. В используемой программе база данных хранится в виде одномерного массива. Она может быть расширена за счет включения других газовых компонентов, а также скорректирована по мере появления более надежных данных по сечениям процессов рассеяния электронов на атомах и молекулах.

Интервал интегрирования выбирается так, чтобы относительное изменение ФРЭЭ на нем составляло $10^{14} - 10^{17}$. В методе оптимального исключения число арифметических операций $\sim n^3$, где n – число узлов разностной сетки. Расчеты для различных смесей показывают, что на интервале интегрирования $(0, 15$ В) при $n = 191$ относительная погрешность вычислений $\varepsilon \leq 0.02$, а при $n = 300$ имеем $\varepsilon \leq 0.01$. При этом время расчета ФРЭЭ с учетом девозбуждения на компьютере типа «Пентий» при $n = 191$ составляет ~ 1 с. Это делает возможным пересчет энергетического распределения электронов и интегральных характеристик ФРЭЭ фактически на каждом шаге вдоль разрядной камеры (или на каждом шаге по времени для электроионизационных лазеров).

6. Численный метод

Обычно решение представленной выше системы уравнений, моделирующей проточный электроразрядный СО-лазер, включая расчет ФРЭЭ, представляет собой трудную задачу. Предлагаемый метод расчета колеба-

тельно-неравновесного течения лазерной смеси CO–N₂ (CO–He, CO–Ag и др.) фактически является методом расщепления, который сводится к последовательному раздельному решению уравнений колебательной кинетики, газовой динамики и уравнений для интенсивностей линий излучения.

Таким образом, расчеты в произвольном сечении резонатора сводятся к следующему «глобальному» итерационному процессу: 1) определение населенностей колебательных уровней f_n, g_n в точке x_{m+1} при известных величинах f_n, g_n в точке x_m и значениях u, T, p, I_n в точках x_m, x_{m+1} ; 2) определение u, T, p в точке x_{m+1} при известных f_n, g_n, I_n в точках x_m, x_{m+1} ; 3) расчет I_n в точке x_{m+1} при известных f_n, g_n, u, T, p в точках x_m, x_{m+1} .

На первой стадии решения рассматриваемой задачи к уравнениям колебательной кинетики (10), (11) применяется полунейвная разностная схема [14]

$$f_n^{m+1} - f_n^m = \Delta x \left[0.6 \left(\frac{F_n}{u} \right)^{m+1} + 0.4 \left(\frac{F_n}{u} \right)^m \right] + \varphi_n, \quad (26)$$

$$g_n^{m+1} - g_n^m = \Delta x \left[0.6 \left(\frac{G_n}{u} \right)^{m+1} + 0.4 \left(\frac{G_n}{u} \right)^m \right]. \quad (27)$$

Здесь следует учитывать, что

$$F_n = A_n f_{n+1} + B_n f_n + C_n f_{n-1} + D_n, \quad (28)$$

$$G_n = A_n^* g_{n+1} + B_n^* g_n + C_n^* g_{n-1} + D_n^*, \quad (29)$$

где коэффициенты $A_n, B_n, C_n, A_n^*, B_n^*, C_n^*$ зависят от $f_0, f_1, \dots, f_{v_1}, g_0, g_1, \dots, g_{v_2}$. Поэтому для решения системы нелинейных алгебраических уравнений (26), (27) применяется последовательность двух скалярных прогонок с итерациями.

Итерационный метод строится следующим образом. Задаются начальные значения населенностей на слое $m+1$ (их можно принять равными значениям f_n, g_n в предыдущей точке x_m) и вычисляются коэффициенты $A_n, B_n, C_n, A_n^*, B_n^*, C_n^*$. Для определения следующего приближения методом прогонки решаются системы уравнений (26) и (27). Затем вновь вычисляются коэффициенты $A_n, B_n, C_n, A_n^*, B_n^*, C_n^*$ и процесс повторяется вплоть до выполнения условия сходимости итераций.

Нами учитывались одноквантовые столкновительные и спонтанные VV-переходы в молекулах CO. Следует подчеркнуть, что в работе [15] была отмечена важность учета многоквантовых столкновительных VV-переходов в молекулах CO при $n > 14$. Очевидно, что при включении в рассмотрение двухквантовых VV-переходов в молекуле CO вместо трехдиагональных систем уравнений (26), (27) необходимо решать пятидиагональные системы уравнений, а при учете трех- и четырехквантовых VV-переходов – соответственно семидиагональные и девятидиагональные. Однако многоквантовые VV-переходы можно учесть и оставаясь в рамках трехдиагональной системы, если населенности для уровней, отстоящих от рассматриваемого на $|\Delta n| \geq 2$, брать из предыдущей итерации.

На второй стадии уравнения газодинамики (13), (14) записываются в виде

$$\frac{dh}{dx} = \frac{\psi}{\rho u}, \quad h = c_p T + \frac{u^2}{2} + e_{\text{vib}}, \quad (30)$$

$$\frac{dq}{dx} = p \frac{dS}{dx}, \quad q = Gu + pS. \quad (31)$$

Для решения уравнений (30), (31) применяется полунейвная разностная схема [14]

$$h^{m+1} - h^m = \Delta x \left[0.6 \left(\frac{\psi}{\rho u} \right)^{m+1} + 0.4 \left(\frac{\psi}{\rho u} \right)^m \right], \quad (32)$$

$$q^{m+1} - q^m = \Delta x \left[0.6 \left(p \frac{dS}{dx} \right)^{m+1} + 0.4 \left(p \frac{dS}{dx} \right)^m \right]. \quad (33)$$

С учетом выражения для h (30) из формулы (33) получается выражение для p^{m+1} :

$$p^{m+1} = \left[Gu^m + p^m S^m + 0.4 \Delta x p^m \left(\frac{dS}{dx} \right)^m - Gu^{m+1} \right] \times \left[S^{m+1} - 0.6 \Delta x \left(\frac{dS}{dx} \right)^{m+1} \right]^{-1}. \quad (34)$$

Из уравнений (12), (16) следует выражение для T^{m+1} :

$$T^{m+1} = \frac{p^{m+1} u^{m+1} S^{m+1}}{RG}. \quad (35)$$

Из уравнений (30), (32) с использованием соотношений (34), (35) получаем

$$c_p T^{m+1} + \frac{(u^{m+1})^2}{2} + e_{\text{vib}}^{m+1} - h^m = \frac{\Delta x (0.4 \psi^m S^m + 0.6 \psi^{m+1} S^{m+1})}{G}. \quad (36)$$

Подставляя в (36) выражения (34) и (35), получаем квадратное уравнение относительно u^{m+1} . Оно может быть записано в виде

$$A \left[(u^{m+1})^2 - (u^m)^2 \right] + B(u^{m+1} - u^m) + C = 0, \quad (37)$$

где

$$A = 0.5 - \frac{c_p D}{R};$$

$$B = c_p D \left[Gu^m + p^m S^m + 0.4 p^m \left(\frac{dS}{dx} \right)^m \Delta x \right] (RG)^{-1};$$

$$D = S^{m+1} \left[S^{m+1} - 0.6 \left(\frac{dS}{dx} \right)^{m+1} \Delta x \right]^{-1}; \quad (38)$$

$$C = A(u^m)^2 + Bu^m + e_{\text{vib}}^{m+1} - h^m$$

$$- \frac{\Delta x (0.4 \psi^m S^m + 0.6 \psi^{m+1} S^{m+1})}{G}.$$

Один из корней уравнения (37) отвечает дозвуковому потоку газа, другой – сверхзвуковому.

С учетом (37) величина u^{m+1} определяется с помощью следующей итерационной процедуры:

$$u_0^{m+1} = u^m, u_{k+1}^{m+1} = u^m - \frac{C}{A(u_k^{m+1} + u^m) + B}, \quad (39)$$

$$k = 0, 1, 2, \dots,$$

где k – номер итерации. При этом используется условие сходимости

$$\frac{|u_{k+1}^{m+1} - u_k^{m+1}|}{u_k^{m+1}} \leq \varepsilon. \quad (40)$$

Как показывают расчеты, сходимость для $\varepsilon \leq 10^{-3}$ достигается за 1–3 итерации при шаге $\Delta x = 0.01$ см. После этого из выражений (34) и (35) вычисляются значения p^{m+1} и T^{m+1} .

Третья стадия – вычисление интенсивностей линий – уже была описана в разд.4.

В случае электроионизационного СО-лазера вместо (26), (27) решается система уравнений

$$f_n^{m+1} - f_n^m = \Delta t [0.6(F_n)^{m+1} + 0.4(F_n)^m] + \varphi_n, \quad (41)$$

$$g_n^{m+1} - g_n^m = \Delta t [0.6(G_n)^{m+1} + 0.4(G_n)^m], \quad (42)$$

а вместо (19) – уравнение

$$I_n^{(l)}(t + \Delta t) = I_n^{(l-1)}(t + \Delta t) \exp \left[\frac{\alpha_{nj}^{(l)}(t + \Delta t)}{\alpha^*} - 1 \right], \quad (43)$$

где Δt – шаг расчета.

Проведенные расчеты показывают, что вычисления газодинамических параметров u , T , p в точке x_{m+1} можно проводить уже после итерационных расчетов f_n , g_n , I_n в этой точке, т.е. вторую стадию можно исключить из «глобальной» итерации.

7. Результаты и их обсуждение

Схема проточного газоразрядного СО-лазера, использованная при расчетах, показана на рис.1. Газовый поток направлен параллельно оси x . Удельная мощность накачки W как функция координаты x задается на интервале $0 \leq x \leq x_H$.

На рис.2 приведены расчетные зависимости КПД проточного лазера на смеси состава $\text{CO}:\text{N}_2 = 1:9$ от удельной вкладываемой мощности W , полученные при различных условиях. Видно, что учет сверхупругих столкновений предсказывает уменьшение КПД (кривая 3 на рис.2). При этом наблюдается увеличение, насыщение, а затем и некоторое понижение КПД лазера при увеличении мощности разряда. Это можно объяснить перераспределением энергии колебательного возбуждения от молекул СО к молекулам N_2 , обусловленным сверхупру-

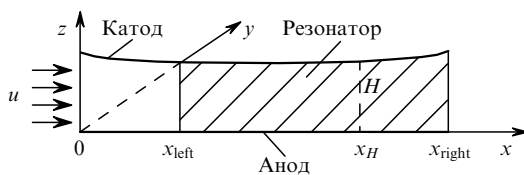


Рис.1. Схема проточного газоразрядного СО-лазера: $0 \leq x \leq x_H$ – область электрического разряда между катодом и анодом; $x_{\text{left}} \leq x \leq x_{\text{right}}$ – область резонатора Фабри–Перо, расположенного параллельно оси y .

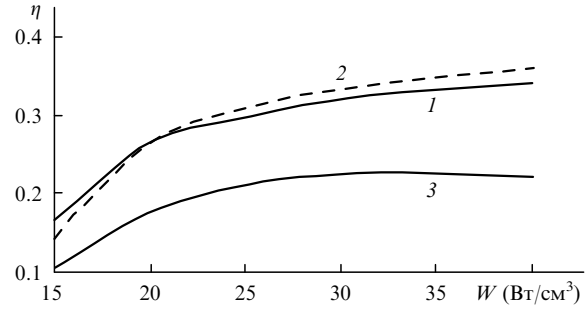


Рис.2. Расчетные зависимости КПД проточного СО-лазера η от вложенной удельной мощности W при постоянном коэффициенте усиления (1), постоянной интенсивности (2) и постоянном коэффициенте усиления с учетом сверхупругих столкновений (3) для $E/N = 2 \cdot 10^{-17}$ В·см², давления на входе в разрядно-резонаторную камеру $p = 10$ кПа, $T = 90$ К, $u = 70$ м/с, длины разрядной камеры $x_H = 9$ см и параметров резонатора $x_{\text{left}} = 4$ см, $x_{\text{right}} = 10$ см, $a = 0.01$, $L = 40$ см, $H = 1$ см.

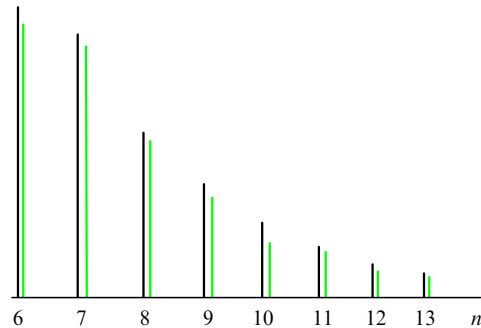


Рис.3. Спектры излучения СО-лазера, полученные при расчете методом постоянной интенсивности (черные линии) и методом постоянного коэффициента усиления (серые линии).

гими столкновениями электронов с этими молекулами. Такой механизм был предложен в работе [16], посвященной импульсному СО-лазеру.

На рис.3 представлен рассчитанный спектр генерации СО-лазера для переходов $n \rightarrow n - 1$. Распределение коэффициентов усиления $\alpha_{6j_6}^P$ и $\alpha_{8j_8}^P$ вдоль оси x , рассчитанных по методу постоянной интенсивности, приведено на рис.4. Максимумы коэффициентов усиления достигаются непосредственно перед резонатором. Затем происходит быстрое уменьшение инверсной населенности и на участке $4.5 < x < 9$ см оба коэффициента усиления остаются чуть выше порогового коэффициента $\alpha^* \approx 0.67 \text{ м}^{-1}$. После отключения накачки ($x = 9$ см) коэффициенты $\alpha_{6j_6}^P$ и $\alpha_{8j_8}^P$ уменьшаются до 0.35 м^{-1} .

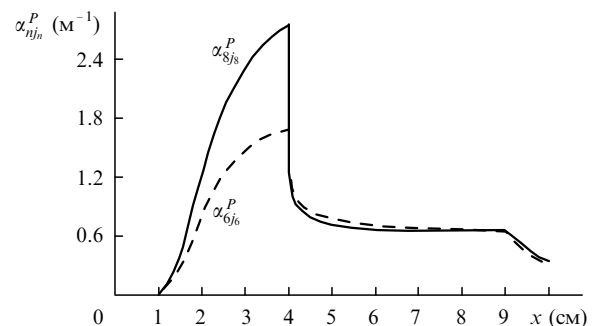


Рис.4. Пространственное распределение коэффициентов усиления $\alpha_{8j_8}^P$ и $\alpha_{6j_6}^P$ вдоль разрядно-резонаторной камеры.

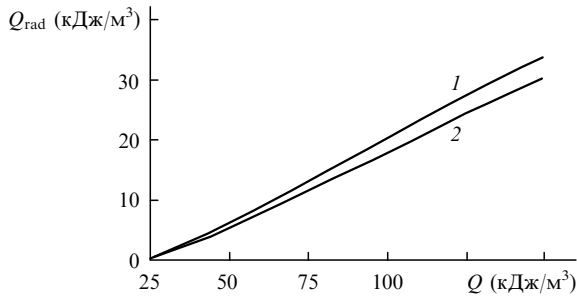


Рис.5. Расчетные (1) и экспериментальные [17] (2) зависимости удельной энергии излучения Q_{rad} от вложенной удельной энергии Q для импульсного СО-лазера. Смесь состава $\text{CO}:\text{N}_2 = 1:6$, начальные температура газа $T = 100$ К и давление $p = 18.3$ кПа, $\tau = 100$ мкс, $\alpha^* = 0.4 \text{ м}^{-1}$.

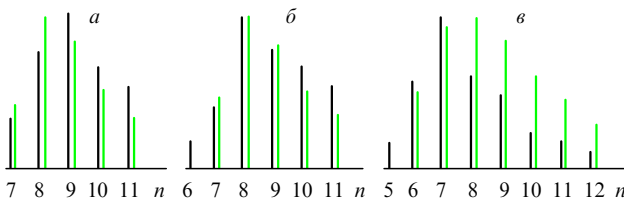


Рис.6. Распределения энергии выходного излучения по номерам переходов при $\tau = 100$ мкс, $Q = 50$ (а), 60 (б) и 120 Дж/л (в). Черные линии – эксперимент [17], серые – расчет при $E/N = 2.46 \cdot 10^{-17}$ (а), $2.7 \cdot 10^{-17}$ (б) и $3.8 \cdot 10^{-17} \text{ В} \cdot \text{см}^2$ (в).

Далее рассмотрим результаты расчетов для импульсных электроионизационных СО-лазеров. На рис.5 представлены зависимости удельной энергии лазера Q_{rad} от удельной энергии разряда $Q = en_e v_e E \tau$, где n_e – концентрация электронов; v_e – их дрейфовая скорость; E – напряженность приложенного электрического поля; τ – длительность импульса накачки. Кривая 1 соответствует расчетным значениям, полученным при E/N , изменяющихся в интервале $2.45\text{--}4.0 \cdot 10^{-17} \text{ В} \cdot \text{см}^2$, а кривая 2 построена по экспериментальным данным работы [17]. Параметры E/N , при которых расчетные значения Q_{rad} совпадают с экспериментальными, оказываются ниже тех, которые соответствуют эксперименту.

На рис.6 приведены распределения энергии выходного излучения для различных переходов и энергокладов при $\tau = 100$ мкс. Серые линии соответствуют расчетам при параметрах E/N , подобранных искусственным путем для достижения совпадения расчетных и экспериментальных значений Q_{rad} . Расчеты, проведенные для значений E/N , определенных из эксперимента [17], дают завышенные КПД и спектры излучения, смещенные в коротковолновую область. Учет перекрытия линий для рассмотренных здесь давлений не оказывает существенного влияния на результаты. Возможно, учет изотопного

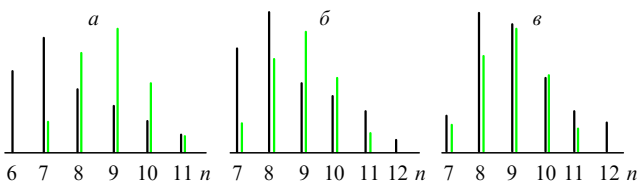


Рис.7. Распределения энергии выходного излучения по номерам колебательных уровней при $p = 18.6$ кПа, $T = 100$ К, $W = 2$ кВт/см³, $\tau = 100$ мкс, $\alpha^* = 0.4 \text{ м}^{-1}$. Черные линии – расчет с учетом перекрытия линий при $E/N = 8.7 \cdot 10^{-17}$ (а), $4.5 \cdot 10^{-17}$ (б) и $3.5 \cdot 10^{-17} \text{ В} \cdot \text{см}^2$ (в); серые линии – эксперимент [18, 19] при $E/N = 8.7 \cdot 10^{-17} \text{ В} \cdot \text{см}^2$.

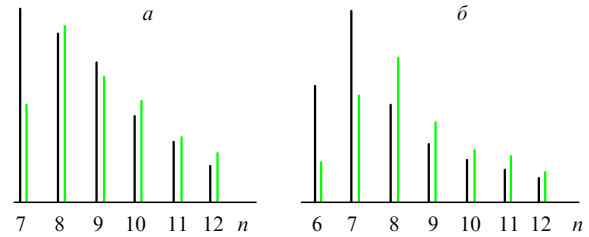


Рис.8. Рассчитанные с учетом (серые линии) и без учета (черные линии) перекрытия линий распределения энергии выходного излучения при $p = 53.2$ кПа, $T = 100$ К, $W = 16.3$ кВт/см³, $\tau = 35$ мкс, $\alpha^* = 0.4 \text{ м}^{-1}$, $E/N = 4.5 \cdot 10^{-17}$ (а) и $8.7 \cdot 10^{-17} \text{ В} \cdot \text{см}^2$ (б).

состава СО улучшил бы согласование расчетов с экспериментом.

На рис.7 представлены результаты расчетов распределений выходной энергии по номерам колебательных уровней для импульсного СО-лазера при различных значениях E/N и результаты экспериментов [18, 19]. Из них следует, что данному энергокладу соответствует приведенная напряженность электрического поля $E/N = 8.7 \times 10^{-17} \text{ В} \cdot \text{см}^2$ в начальный момент времени. Поскольку в экспериментах изменение напряженности поля в разрядном промежутке за время разряда не превышало 30 %, то в расчете E/N полагалось постоянным. Следует отметить, что учет перекрытия линий в данном случае практически не меняет результатов расчета и не позволяет получить лучшее согласие их с результатами эксперимента. Добиться этого согласия можно, если искусственно снизить E/N , используемое в расчете, с $8.7 \cdot 10^{-17}$ до $3.57 \cdot 10^{-17} \text{ В} \cdot \text{см}^2$.

Аналогичные приведенным на рис.7 зависимости, полученные при других исходных параметрах, показаны на рис.8. Видно, что даже при значительном увеличении давления, когда перекрытие линий излучения увеличивается, спектр излучения смещается в длинноволновую область не более чем на $\Delta n = 1$. Анализ полученных результатов позволяет сделать вывод о том, что перекрытие линий приводит к смещению спектра генерации в длинноволновую область и уменьшению КПД лазера.

8. Заключение

Предложен эффективный метод расчета проточных газоразрядных и импульсных электроионизационных СО-лазеров. Математическая модель проточного газоразрядного СО-лазера включает 110 уравнений колебательной кинетики для молекул СО и N_2 , уравнения радиационной газодинамики, а также уравнение для функции распределения электронов по энергиям. Расчеты показали, что можно ограничиться учетом 20 колебательных уровней азота и 40 колебательных уровней монооксида углерода, поскольку населенности вышестоящих уровней становятся пренебрежимо малыми. Предложенный метод является фактически методом расщепления и позволяет решать системы уравнений колебательной кинетики, газодинамики и уравнения для интенсивностей линий излучения в резонаторе по отдельности. Разработанная программа позволяет рассчитывать населенности колебательных уровней молекул СО и N_2 , коэффициенты усиления для колебательно-вращательных переходов в СО, интенсивности линий излучения СО-лазера, его выходную мощность и КПД. Имеющееся расхождение с экспериментом может быть объяснено тем, что

получаемая из расчетов ФРЭЭ доля электрической мощности, идущая в поступательные и вращательные степени свободы молекул, оказывается ниже измеренной в эксперименте. Модель можно усовершенствовать также путем учета двухквантовых и многоквантовых VV-переходов в молекуле СО.

1. Арасланов Ш.Ф., Сафиуллин Р.К. *Матер.докл. II Международ. симп. по энергетике, окружающей среде и экономике* (Казань, 1998, т. II, с. 80).
2. Гордиец Б.Ф., Осипов А.И., Шелепин Л.А. *Кинетические процессы в газах и молекулярные лазеры* (М., Наука, 1980).
3. Данилычев В.А., Керимов О.М., Ковш И.Б. *Молекулярные газовые лазеры высокого давления* (Итоги науки и техники. Сер. Радиотехника. М., 1977, т.12).
4. Булавин Р.Е., Бучанов В.В., Молодых Э.И. *Квантовая электроника*, **11**, 688 (1984).
5. Дидюков А.И., Кирко В.Ю., Кулагин Ю.А., Шелепин Л.А. *Труды ФИАН*, **144**, 107 (1984).
6. Конев Ю.Б., Кочетов И.В., Певгов В.Г., Шарков В.Ф. *Препринт ИАЭ № 2821* (М., 1977).
7. Хьюбер К.П., Герцберг Г. *Константы двухатомных молекул* (М., Мир, 1984, ч.1).
8. Mantz A.W., Maillard J.-P., Roth V.W., Narahari Rao K. *J. Molecular Spectroscopy*, **57**, 155 (1975).
9. Лосев С.А., Макаров В.Н. В кн. *Теоретическое исследование процессов в газодинамических лазерах* (М., 1979, с. 87).
10. Конев Ю.Б., Кочетов И.В., Певгов В.Г. *ЖТФ*, **49**, 1266 (1979).
11. Арасланов Ш.Ф. *Расчет функции распределения электронов по энергиям в слабоионизованной плазме разряда в смеси газов СО₂, N₂, СО, О₂, Н₂, He* (Казань, НИИ математики и механики им. Н.Г.Чеботарева при Казанском гос.ун-те. Рукопись депонирована в ВИНТИ, № 2187-В87, 1987).
12. Арасланов Ш.Ф., Сафиуллин Р.К. *Изв.вузов.Сер.Проблемы энергетике*, № 8, 61 (1999).
13. Крылов В.И., Бобков В.В., Монастырный П.И. *Вычислительные методы* (М., Наука, 1976, т.1).
14. Лосев С.А. *Газодинамические лазеры* (М., Наука, 1977).
15. Ионин А.А., Климачев Ю.М., Конев Ю.Б., Курносое А.К., Напартович А.П., Синицын Д.В., Терехов Ю.В. *Квантовая электроника*, **30**, 573 (2000).
16. Исламов Р.Ш., Конев Ю.Б., Кочетов И.В., Курносое А.К. *Квантовая электроника*, **11**, 210 (1984).
17. Басов Н.Г., Данилычев В.А., Ионин А.А., Казакевич В.С., Ковш И.Б., Полетаев Н.Л. *Квантовая электроника*, **6**, 1215 (1979).
18. Басов Н.Г., Данилычев В.А., Ионин А.А., Ковш И.Б. *Труды ФИАН*, **116**, 54 (1979).
19. Басов Н.Г., Данилычев В.А., Ионин А.А., Казакевич В.С., Ковш И.Б., Полетаев Н.Л. *Квантовая электроника*, **6**, 1208 (1979).