

# Влияние колебательно-возбужденных молекул $O_2(a^1\Delta_g)$ на характеристики активной среды кислородно-иодного лазера

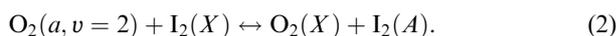
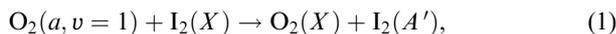
В.Н.Аяззов, И.О.Антонов, С.Ю.Пичугин, Н.И.Уфимцев

*Сравнение экспериментальных и расчетных результатов показало, что в активной среде кислородно-иодного лазера при тушении одной молекулы синглетного кислорода образуется в среднем 4.5 колебательных кванта молекулы  $O_2$ . Изучены зависимости пороговой доли синглетного кислорода и коэффициента усиления от доли колебательно-возбужденных молекул  $O_2(a^1\Delta_g)$ . Пороговая доля синглетного кислорода увеличивается с ростом доли колебательно-возбужденных молекул  $O_2$  и может быть на несколько процентов больше, чем считалось ранее. Коэффициент усиления слабо зависит от доли колебательно-возбужденных молекул кислорода.*

**Ключевые слова:** синглетный кислород, колебательное возбуждение, кислородно-иодный лазер.

## 1. Введение

Экспериментально показано, что в активной среде химического кислородно-иодного лазера (ХКИЛ) среднее число запасенных колебательных квантов молекул кислорода достигает 0.3–0.4 [1, 2]. Колебательно-возбужденные молекулы  $O_2$  могут играть важную роль в процессах формирования активной среды ХКИЛ, особенно при диссоциации  $I_2$ . В работах [3–5] было выдвинуто предположение, что колебательно-возбужденные молекулы синглетного кислорода (СК) могут участвовать в процессах заселения нижних электронно-возбужденных состояний иода:

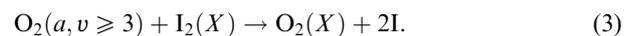


Здесь и далее  $O_2(X)$ ,  $O_2(a)$  и  $O_2(b)$  – молекулы кислорода в основном электронном состоянии  $X^3\Sigma_g^-$  и в электронно-возбужденных состояниях  $a^1\Delta_g$  и  $b^1\Sigma_g^+$  соответственно;  $I$  и  $I^*$  – атомы иода в основном электронном состоянии  $^2P_{3/2}$  и в возбужденном состоянии  $^2P_{1/2}$ ;  $I_2(X)$ ,  $I_2(A')$  и  $I_2(A)$  – молекулы иода в основном состоянии  $X^1\Sigma_g^+$  и в электронно-возбужденных состояниях  $A'^3\Pi_u$  и  $A^3\Pi_u$  соответственно. Уровни энергии, отвечающие данным электронным состояниям, показаны на рис.1. Там же приведены уровни энергии, соответствующие колебательному возбуждению молекул кислорода  $O_2(X)$ ,  $O_2(a)$  и  $O_2(b)$  и трем типам колебаний молекулы воды в основном электронном состоянии. В целом ряде работ [3–7] высказывалось предположение, что электронно-возбужденные состояния иода  $I_2(A)$  и  $I_2(A')$  могут являться промежуточными в процессе его диссоциации. В

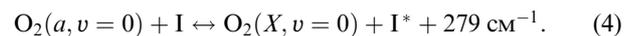
В.Н.Аяззов, И.О.Антонов, С.Ю.Пичугин, Н.И.Уфимцев. Самарский филиал Физического института им. П.Н.Лебедева РАН, Россия, 443011 Самара, ул. Ново-Садовая, 221; тел./факс: 7(8462)35 56 00, e-mail: azyazov@fian.smr.ru

Поступила в редакцию 28 января 2004 г., после доработки – 12 июля 2004 г.

[8] было выдвинуто предположение, что молекула иода может развалиться при столкновении с молекулой  $O_2(a, v \geq 3)$  в процессе



ХКИЛ действует на спин-орбитальном переходе атомарного иода  $I^* \rightarrow I$  с длиной волны излучения  $\lambda = 1315$  нм. Данный переход инвертируется в ходе квазирезонансной передачи электронной энергии от СК. Долгое время считалось, что доля колебательно-возбужденных молекул кислорода в активной среде ХКИЛ ничтожна, и поэтому инвертирование лазерного перехода осуществляется в основном в процессе



Эксперименты [1, 2] и расчеты [9] показывают, что доля колебательно-возбужденных молекул кислорода в активной среде ХКИЛ является существенной. В связи с этим колебательно-возбужденные молекулы  $O_2(a, v = 1)$  и  $O_2(a, v = 2)$  наряду с молекулами  $O_2(a, v = 0)$  будут участвовать в инвертировании лазерного перехода в ХКИЛ в процессах

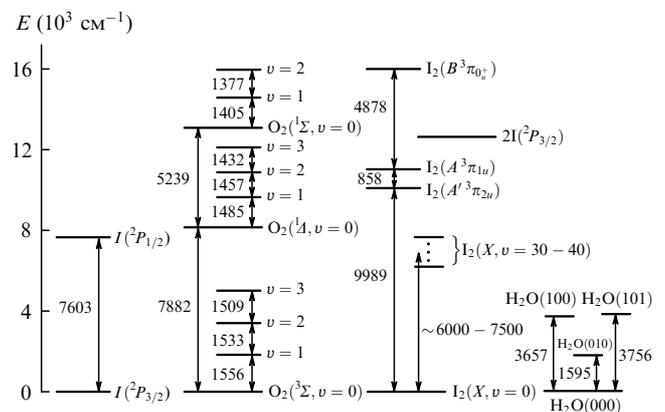
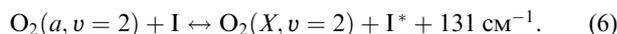
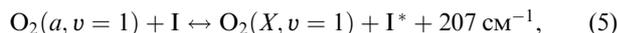


Рис.1. Схема энергетических уровней электронно- и колебательно-возбужденных состояний  $O_2$ ,  $I_2$ ,  $I$  и  $H_2O$ .



Дефект энергии в процессах (5) и (6) уменьшается с ростом  $v$  из-за разницы в энергиях колебательного возбуждения молекулы кислорода в основном и синглетном состояниях (рис.1). При этом равновесие в данных процессах смещается влево. Константы равновесия процессов (4)–(6) влияют как на пороговую долю СК, так и на коэффициент усиления активной среды. Повышение содержания колебательно-возбужденных молекул СК будет приводить к росту пороговой доли СК и уменьшению коэффициента усиления.

Основная проблема при моделировании колебательной кинетики в активной среде ХКИЛ состоит в отсутствии данных о распределении выделяющейся в реакции энергии по продуктам реакции. Неизвестна доля энергии, идущая в колебательные степени свободы кислорода при деактивации молекулы СК. Также неизвестны вероятности возбуждения колебательных уровней  $O_2$  в релаксационных процессах. В данной работе из сравнения результатов расчетов и экспериментов оценивается среднее число колебательных квантов, образующихся при тушении одной молекулы СК. Приводятся формулы для расчетов пороговой доли СК и коэффициента усиления в зависимости от доли колебательно-возбужденных молекул  $O_2$  в активной среде ХКИЛ.

## 2. Образование $O_2(v)$

Колебательно-возбужденные молекулы  $O_2$  образуются уже на стадии генерации СК в реакционной зоне генератора СК (ГСК) и на стадии транспортировки СК до резонатора в процессах

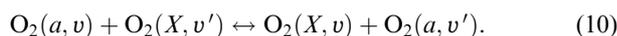


В реакции пулинга (7) образуются колебательно-возбужденные молекулы кислорода  $O_2(b, v)$  с вероятностями выхода  $\gamma_{7,0} = 0.32$ ,  $\gamma_{7,1} = 0.04$  и  $\gamma_{7,2} = 0.64$  [10]. Здесь и далее  $\gamma_{j,i}$  – вероятность образования колебательно-возбужденной молекулы кислорода в  $j$ -й реакции на  $i$ -м колебательном уровне. В работе [3] получены простые формулы для расчета относительных населенностей кислорода по колебательным уровням на выходе ГСК.

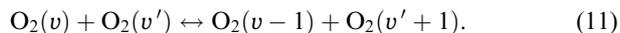
При добавлении иода в кислородный поток скорость наработки колебательно-возбужденных молекул  $O_2$  резко возрастает за счет процесса



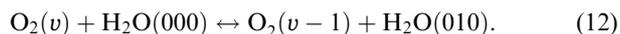
Вероятности образования колебательно-возбужденных молекул кислорода  $\gamma_{j,i}$  для реакций (8) и (9) неизвестны. Перераспределение колебательных квантов энергии между тремя электронно-возбужденными состояниями кислорода –  $O_2(X)$ ,  $O_2(a)$ ,  $O_2(b)$  – наиболее эффективно осуществляется в ходе быстрых процессов ЕЕ-обмена, например



Перераспределение колебательных квантов энергии между колебательными уровнями  $O_2$  происходит в ходе VV-обмена



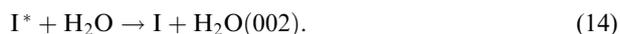
Отличительной особенностью кислородной среды является низкая скорость VT-релаксации. Преобразование колебательной энергии  $O_2$  в тепловую осуществляется преимущественно следующим образом [9]. На первом этапе кислород передает колебательную энергию молекуле воды в ходе VV'-обмена



Энергии колебательного возбуждения молекулы  $O_2$  и изгибной моды молекулы  $H_2O$  близки друг другу (рис.1). В связи с этим процесс VV-обмена между данными молекулами протекает быстро. На втором этапе колебательная энергия передается в поступательные степени свободы в процессе



Необходимо учесть, что наряду с реакцией (12) колебательно-возбужденные молекулы воды образуются в быстром процессе

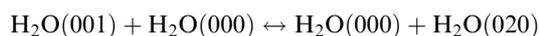


Экспериментально было найдено, что средний запас колебательных квантов молекул кислорода  $\eta_v = N_v/N_{Ox}$  составляет около 0.01–0.02 на выходе ГСК [9] и 0.3–0.4 в активной среде ХКИЛ [1, 2]. Здесь и далее  $N_v = \sum_i iN_i$  – суммарное число колебательных квантов молекулы кислорода в единице объема;  $N_i$  – населенность колебательно-возбужденных молекул  $O_2$  на  $i$ -м колебательном уровне;  $N_{Ox}$  – общая концентрация кислорода. Сравнительные экспериментальные значения  $\eta_v$  с расчетными, оцененным среднее число колебательных квантов молекулы  $O_2$ , образующихся при тушении молекулы СК в активной среде ХКИЛ,  $n_v = \sum_{j,i} i\gamma_{j,i}$ . Величина  $N_v$  находится из следующего балансного уравнения:

$$\frac{dN_v}{dt} = (\gamma_{9,1} + 2\gamma_{9,2} + \gamma_{8,1} + 2\gamma_{8,2} + 3\gamma_{8,3})K_9N_aN_{I^*} - K_{12}N_vN_w + K_{12}^-N_{Ox}N_{wv}, \quad (15)$$

где  $N_{I^*}$ ,  $N_a$  и  $N_w$  – концентрации атомов  $I^*$ , молекул  $O_2(a)$  и  $H_2O$  соответственно;  $t$  – время;  $K_j$  и  $K_j^-$  – константы скорости  $j$ -го прямого и обратного процессов. Первый член в правой части уравнения (15) эффективно учитывает скорость образования колебательных квантов в процессах (8) и (9).

Входящее в уравнение (15) суммарное число колебательных квантов молекул воды в единице объема  $N_{wv}$  найдем из баланса их образования в процессах (12) и (14) и тушения в процессе (13). Учтем, что VV-обмен энергией между изгибной ( $H_2O(010)$ ) и валентной ( $H_2O(001)$ ) модами



происходит гораздо быстрее, чем VT-релаксация колебаний валентных мод [11]. Из-за этого колебательные кванты молекулы  $H_2O$  аккумулируются преимущественно на изгибной моде. Можно полагать также, что в процессе (14) в итоге образуются четыре колебательных кванта на изгибной моде молекулы  $H_2O$ . С учетом этого было получено уравнение для  $N_{wv}$ :

$$\frac{dN_{wv}}{dt} = 4K_{14}N_wN_{I^*} + K_{12}N_vN_w - K_{12}^-N_{ox}N_{wv} - K_{13}N_{wv}N_w. \quad (16)$$

Преобразование балансных уравнений (15), (16) для квазистационарных условий ( $dN_v/dt = dN_w/dt = 0$ ) дает следующие выражения для среднего запаса колебательных квантов молекулы кислорода ( $\eta_v$ ) и молекулы воды ( $\eta_{wv} = N_{wv}/N_{ox}$ ):

$$\eta_v = \frac{n_v K_9 \eta_a \eta_{I^*} + K_{12}^- \eta_{wv}}{K_{12} \eta_w}, \quad (17)$$

$$\eta_{wv} = \frac{4K_{14} \eta_w \eta_{I^*} + K_{12} \eta_v \eta_w}{K_{12}^- + K_{13} \eta_w}, \quad (18)$$

где  $n_v = \gamma_{9,1} + 2\gamma_{9,2} + \gamma_{8,1} + 2\gamma_{8,2} + 3\gamma_{8,3}$ ;  $\eta_{I^*} = N_{I^*}/N_{ox}$ ;  $\eta_a = N_a/N_{ox}$ ;  $\eta_w = N_w/N_{ox}$ .

Подстановка (18) в (17) и простые преобразования позволяют получить выражение

$$\eta_v = \frac{n_v K_9 \eta_a \eta_{I^*} (1 + \eta_w K_{13}/K_{12}^-) + 4K_{14} \eta_w \eta_{I^*}}{K_{eq12} K_{13} \eta_w^2}, \quad (19)$$

где  $K_{eqj}$  – константа равновесия  $j$ -го процесса. В экспериментах [1, 2]  $\eta_v \approx 0.3$ ,  $\eta_a \approx 0.5$ ,  $\eta_{I^*} \approx 0.01$ ,  $\eta_w \approx 0.03$ , температура газа  $T \approx 400$  К. Константы скоростей реакций  $K_9$ ,  $K_{12}$ ,  $K_{13}$  и  $K_{14}$  равны соответственно  $1.8 \times 10^{-13}$  см<sup>3</sup>/с [12],  $1.7 \times 10^{-12}$  см<sup>3</sup>/с [13],  $5 \times 10^{-11}$  см<sup>3</sup>/с [11] и  $2.3 \times 10^{-12}$  см<sup>3</sup>/с [14]. Подставив эти значения в выражение (19), мы получим среднее число колебательных квантов, образующихся при тушении одной молекулы СК,  $n_v \approx 4.5$ .

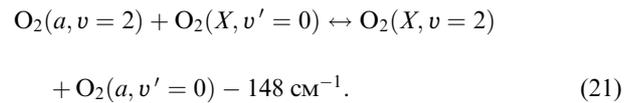
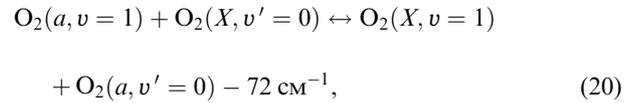
### 3. Пороговая доля $O_2(a)$

В активной среде ХКИЛ на спин-орбитальном переходе  $I^* \rightarrow I$  коэффициент усиления  $g = 7\sigma(N_{I^*} - N_I/2)/12$  больше нуля, если относительная населенность СК  $\eta_a$  выше некоторой пороговой величины  $\eta_a^{th} = N_a^{th}/N_{ox}$  (где  $N_a^{th}$  – пороговая концентрация  $O_2(a)$ ,  $\sigma$  – поперечное сечение индуцированного излучения перехода  $I(^2P_{1/2}, F=3) \rightarrow I(^2P_{3/2}, F=4)$ ). Пороговая доля СК определяется из условия  $g = 0$ . Если населенности молекул  $O_2(v=1)$  и  $O_2(v=2)$  близки к равновесным, то вкладом процессов (5) и (6) можно пренебречь. В этом случае пороговая доля СК зависит только от температуры газа  $T$  и рассчитывается по формуле  $\eta_a^{th} = 1/(2K_{eq4} + 1)$ , где  $K_{eq4} = 0.75 \times \exp[\Delta E_4/(kT)]$ ;  $\Delta E_4$  – дефект энергии процесса (4). При комнатной температуре пороговая доля  $O_2(a)$  в данном случае составляет 0.15.

Экспериментально показано, что в активной среде ХКИЛ концентрация  $O_2(a, v)$  является неравновесной. Увеличение доли колебательно-возбужденных молекул кислорода в активной среде ХКИЛ приведет к росту пороговой доли СК. Лазерный переход в атоме иода при  $T = 300$  К будет инвертирован в процессе (5), если отно-

сительная населенность СК на первом колебательном уровне  $\eta_{a1} = 0.2$ , и в процессе (6), если  $\eta_{a2} = 0.26$ . Суммарная пороговая доля  $O_2(a)$   $\eta_a^{th}$  зависит не только от температуры газа, но и от относительного содержания колебательно-возбужденных молекул кислорода в смеси.

Перераспределение колебательных квантов между молекулами  $O_2(a)$  и  $O_2(X)$  наиболее эффективно происходит в следующих процессах ЕЕ-обмена:



Скорости процессов (4)–(6), (20) и (21) намного превышают скорости других процессов, поэтому населенности атомов иода на верхнем ( $N_{I^*}$ ) и нижнем ( $N_I$ ) уровнях и населенности СК на  $i$ -х колебательных уровнях ( $N_{ai}$ ) могут быть с хорошей точностью выражены через константы равновесия данных процессов и относительные населенности кислорода на уровнях с  $v = 0, 1$  и 2. Населенности  $N_{ai}$  можно найти из следующих балансных уравнений:

$$\frac{dN_{a0}}{dt} = K_4^- N_{X0} N_{I^*} + K_{20} N_{a1} N_{X0} + K_{21} N_{a2} N_{X0} - K_4 N_{a0} N_I - K_{20}^- N_{a0} N_{X1} - K_{21}^- N_{a0} N_{X2}, \quad (22)$$

$$\frac{dN_{a1}}{dt} = K_5^- N_{X1} N_{I^*} - K_5 N_{a1} N_I + K_{20}^- N_{X1} N_{a0} - K_{20} N_{a1} N_{X0}, \quad (23)$$

$$\frac{dN_{a2}}{dt} = K_6^- N_{X2} N_{I^*} - K_6 N_{a2} N_I + K_{21}^- N_{X2} N_{a0} - K_{21} N_{a2} N_{X0}, \quad (24)$$

где  $N_{Xi}$  – концентрация кислорода в основном электронном состоянии на  $i$ -м колебательном уровне. В данной работе ограничимся рассмотрением населенностей СК для уровней с  $v = 0, 1$  и 2, полагая, что вкладом населенностей уровней с  $v \geq 3$  при расчете пороговой доли и коэффициента усиления можно пренебречь. Следует заметить, что колебательно-возбужденные молекулы СК ( $v \geq 3$ ) могут играть важную роль в процессе диссоциации  $I_2$ , например в реакции (3) [8]. Константы скоростей процессов ЕЕ-обмена (20) ( $K_{20} = 5.6 \times 10^{-11}$  см<sup>3</sup>/с) и (21) ( $K_{21} = 3.6 \times 10^{-11}$  см<sup>3</sup>/с) одного порядка с аналогичными константами процессов (4)–(6) [15]. Относительное содержание атомов иода в активной среде ХКИЛ составляет несколько процентов от относительного содержания молекул кислорода. По этим причинам вкладом первых двух членов в правых частях уравнений (23) и (24) можно пренебречь. Для квазистационарных условий из уравнений (23) и (24) найдем относительные населенности  $O_2(a)$  на уровнях с  $v = 1$  и 2 соответственно:

$$\eta_{a1} = \frac{\eta_{I^*} \eta_{a0}}{K_{eq20} (\eta_0 - \eta_{a0}) + \eta_{a0}}, \quad (25)$$

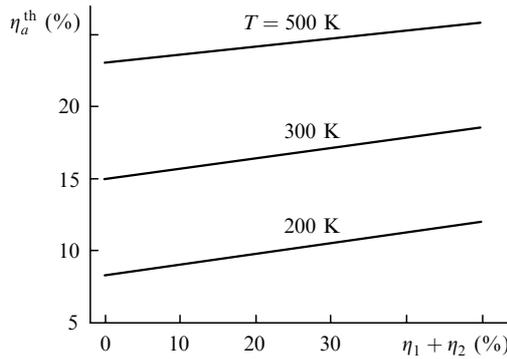


Рис.2. Рассчитанные зависимости пороговой доли  $O_2(a)$  от относительной концентрации колебательно-возбужденных молекул кислорода  $\eta_1 + \eta_2$  для различных температур при  $\eta_1/\eta_2 = 7/3$ .

$$\eta_{a2} = \frac{\eta_2 \eta_{a0}}{K_{eq21}(\eta_0 - \eta_{a0}) + \eta_{a0}} \quad (26)$$

В дальнейшем мы будем использовать нормированный коэффициент усиления

$$g_n = \frac{24g}{7\sigma N_{I_0}} = 3\theta - 1, \quad (27)$$

где  $N_{I_0} = N_{I^+} + N_I$ ;  $\theta = N_{I^+}/N_{I_0}$ . При относительной концентрации  $O_2(a)$ , равной пороговой доле, нормированный коэффициент усиления  $g_n = 3\theta - 1 = 0$ , и тогда  $\theta = 1/3$ . Складывая правые части уравнений (22)–(24), для квазистационарных условий ( $dN_{ai}/dt = 0$ ) мы получили выражение для пороговой доли молекул СК на нулевом колебательном уровне  $\eta_{a0}^{th}$ :

$$\eta_{a0}^{th} = \frac{\eta_0 - 2\beta_1 K_{eq5} \eta_{a1} + \beta_1(\eta_1 - \eta_{a1})}{2K_{eq4} + 1} - \frac{2\beta_2 K_{eq6} + \beta_2(\eta_2 - \eta_{a2})}{2K_{eq4} + 1}, \quad (28)$$

где  $\beta_1 = K_5^-/K_4^-$ ;  $\beta_2 = K_6^-/K_4^-$ . Пороговые доли молекул СК  $O_2(a, v)$  на уровнях с  $v = 0, 1, 2$  рассчитывались с помощью итерационной процедуры из системы уравнений (25), (26) и (28). Зависимости суммарной пороговой доли СК  $\eta_a^{th} = \sum \eta_{ai}^{th}$  от относительной концентрации колебательно-возбужденного кислорода  $\eta_1 + \eta_2$  (где  $\eta_1, \eta_2$  – относительные населенности первого и второго колебательных уровней молекулы  $O_2$ ) для трех температур газа представлены на рис.2. Отношение  $\eta_1/\eta_2$  было принято равным  $7/3$ . Из рис.2 видно, что пороговая доля увеличивается с ростом доли колебательно-возбужденных молекул  $O_2$  и может быть на несколько процентов больше общепринятого значения. Для рис.2 величины  $\beta_1$  и  $\beta_2$  считались равными единице. Варьирование  $\beta_1$  и  $\beta_2$  от 0.2 до 2 показало, что пороговая доля слабо зависит от них.

#### 4. Коэффициент усиления ХКИЛ

В балансное уравнение для концентрации возбужденных атомов иода  $N_{I^+}$  были включены только процессы (4)–(6), т. к. скорости протекания других процессов в активной среде ХКИЛ на несколько порядков ниже. Относительная стационарная концентрация возбужденных атомов иода  $\theta$ , найденная из балансного уравнения, определяется из выражения

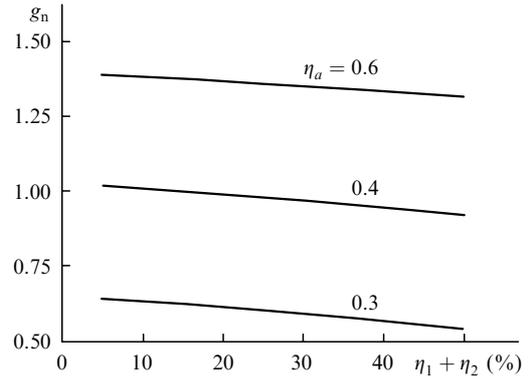


Рис.3. Зависимости нормированного коэффициента усиления  $g_n$  от относительной концентрации колебательно-возбужденных молекул кислорода  $\eta_1 + \eta_2$  при  $T = 300$  К, относительном содержании  $I_2$  в кислородном потоке  $\eta_{I_2} = 0.01$ ,  $\eta_1/\eta_2 = 7/3$  для различных относительных концентраций  $O_2(a)$ .

$$\theta = (K_{eq4}\eta_{a0} + K_{eq5}\beta_1\eta_{a1} + K_{eq6}\beta_2\eta_{a2})[K_{eq4}\eta_{a0} + K_{eq5}\beta_1\eta_{a1} + K_{eq6}\beta_2\eta_{a2} + (\eta_0 - \eta_{a0}) + \beta_1(\eta_1 - \eta_{a1}) + \beta_2(\eta_2 - \eta_{a2})]^{-1}, \quad (29)$$

где  $\eta_{a0} = \eta_a - \eta_{a1} - \eta_{a2}$ . Как следует из выражения (29), для ХКИЛ нормированный коэффициент усиления  $g_n$  зависит не только от температуры, но и от относительного содержания колебательно-возбужденных молекул кислорода и отношения констант скоростей процессов (4)–(6). Величины  $\eta_{a1}$  и  $\eta_{a2}$  рассчитывались из уравнений (25) и (26). На рис.3 представлены зависимости  $g_n$  от доли колебательно-возбужденного кислорода  $\eta_1 + \eta_2$  (отношение  $\eta_1/\eta_2$  считали равным  $7/3$ ). Видно, что  $g_n$  слабо зависит от  $\eta_1 + \eta_2$ . При расчете этих зависимостей полагалось, что  $\beta_1, \beta_2 = 1$ .

Константы скоростей реакций (5) и (6) неизвестны. На рис.4 продемонстрировано влияние отношения констант скоростей процессов (4)–(6) на коэффициент усиления активной среды ХКИЛ. Величины  $\beta_1$  и  $\beta_2$  варьировались в пределах 0.1–5.0. При  $K_4 \gg K_5, K_6$  вклад колебательно-возбужденных молекул СК в процесс возбуждения лазерного перехода незначителен. Однако это не приводит к падению коэффициента усиления. В этом случае коле-

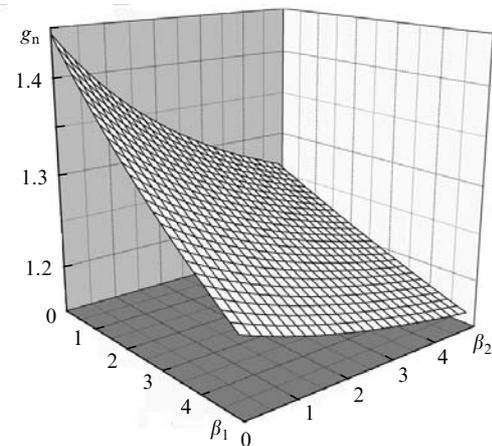


Рис.4. Зависимость нормированного коэффициента усиления  $g_n$  от отношений констант скоростей  $\beta_1$  и  $\beta_2$  при  $\eta_a = 0.6$ ,  $\eta_1 + \eta_2 = 0.3$ ,  $\eta_1/\eta_2 = 7/3$ ,  $\eta_{I_2} = 0.01$ .

бательно-возбужденные молекулы СК служат своеобразным резервуаром энергии. В режиме генерации лазерного излучения по мере уменьшения населенности  $O_2(a, v=0)$  электронная энергия будет эффективно перекачиваться от  $O_2(a, v=1)$  и  $O_2(a, v=2)$  к  $O_2(a, v=0)$  в ходе быстрых обменных ЕЕ-процессов (20) и (21). При  $K_4 < K_5, K_6$  вклад процессов (5) и (6) приводит к уменьшению коэффициента усиления из-за относительного роста скоростей этих процессов в обратном направлении.

## 5. Заключение

Сравнение расчетных значений среднего запаса колебательных квантов в активной среде ХКИЛ с измеренными в [1, 2] показало, что при тушении одной молекулы  $O_2(a)$  в процессах (8), (9) образуется в среднем  $n_v \approx 4.5$  колебательных кванта кислорода. Более высокое значение  $n_v$  в кислородно-иодной среде по сравнению с  $n_v \approx 4$  на выходе ГСК [9] можно объяснить дополнительной наработкой колебательных квантов молекул  $H_2O$  в процессе (14). Рост концентрации молекул  $H_2O$  (010) ведет к уменьшению скорости стока колебательной энергии, запасенной в кислороде, в реакции (12). Скорость процесса пулинга (9) увеличивается с ростом температуры [16]. Хорошо известно, что колебательная энергия наряду с тепловой может приводить к увеличению скорости протекания реакции (9) [17]. По этой причине полученная оценка  $n_v$  может быть завышенной.

Отсутствие данных по константам скоростей процессов (5) и (6) и вероятностям распределения дефекта энергии по продуктам реакций (8) и (9) усложняет моделирование кинетических процессов в ХКИЛ. Расчеты показывают, что пороговая доля СК в активной среде ХКИЛ зависит не только от температуры газа, но также от доли колебательно-возбужденных молекул кислорода в ней.

Пороговая доля  $O_2(a)$  может быть на несколько процентов выше, чем это считалось ранее. Коэффициент усиления среды слабо зависит от содержания колебательно-возбужденных молекул кислорода в активной среде ХКИЛ.

Работа выполнена при поддержке Губернского гранта в области науки и техники № 15Г/2003 и гранта РФФИ № 04-02-96506.

1. Antonov I.O., Azyazov V.N., Pichugin S.Yu., Ufimtsev N.I. *Chem. Phys. Lett.*, **376**, 168 (2003).
2. Аязов В.Н., Антонов И.О., Пичугин С.Ю., Сафонов В.С., Свистун М.И., Уфимцев Н.И. *Квантовая электроника*, **33**, 811 (2003).
3. Аязов В.Н., Игошин В.И., Куприянов Н.Л. *Кр. сообщ. физ. ФИАН*, № 1-2, 24 (1992).
4. Аязов В.Н., Пичугин С.Ю., Сафонов В.С., Уфимцев Н.И. *Квантовая электроника*, **31**, 794 (2001).
5. Загидуллин М.В. *Канд. дис.* (М., ФИАН, 1986).
6. Komissarov A.V., Goncharov V., Heaven M.C. *Proc. SPIE Int. Soc. Opt. Eng.*, **4184**, 7 (2001).
7. Arnold S.J., Finlayson N., Ogruzlo E.A. *J. Chem. Phys.*, **44**, 2529 (1966).
8. Бирюков А.С., Щеглов В.А. *Квантовая электроника*, **13**, 511 (1986).
9. Аязов В.Н., Сафонов В.С., Уфимцев Н.И. *Квантовая электроника*, **30**, 687 (2000).
10. Schurath U. *J. Photochem.*, **4**, 215 (1975).
11. Finzi J., Hovis F.E., Panfilov V.N., Hess P., Moore C.B. *J. Chem. Phys.*, **67**, 4053 (1977).
12. Perram G.P. *Int. J. Chem. Kinet.*, **27**, 817 (1995).
13. Lopez-Puertas M., Zaragoza G., Kerridge B.J., Taylor F.W. *J. Geophys. Res.*, **100**, 9131 (1995).
14. Burde D.H., McFarlane R.A. *J. Chem. Phys.*, **64**, 1850 (1976).
15. Hwang E.S., Copeland R.A., Slinger T.G. (in press).
16. Heidner III R.F., Gardner C.E., El-Sayed T.M., Segal G.I., Kasper J.V.V. *J. Chem. Phys.*, **74**, 5618 (1981).
17. Antonov I.O., Azyazov V.N., Ufimtsev N.I. *J. Chem. Phys.*, **119**, 10638 (2003).