## ЛАЗЕРЫ

PACS 42.55.Lt; 42.60.Lh

## Численное моделирование основных характеристик DF-CO<sub>2</sub>-лазера высокого давления для усиления пикосекундных импульсов излучения

## В.Я.Агроскин, Б.Г.Бравый, Г.К.Васильев, С.А.Каштанов, Е.Ф.Макаров, С.А.Сотниченко, Ю.А.Чернышев

С использованием схемы, включающей в себя основные химические и релаксационные процессы, проведено численное моделирование характеристик усиления в среде импульсного  $DF-CO_2$ -лазера в десятимикронной области излучения при давлениях рабочих смесей от 1 до 2.5 атм, экспериментально определенных в работе [4]. Показано, что выбранная схема процессов позволяет: 1) количественно описывать экспериментальные данные, касающиеся поведения коэффициентов усиления во времени; 2) объяснять причину ранней деградации коэффициентов усиления (при степени превращения  $D_2$  примерно 20%); 3) из сравнения экспериментальных и рассчитанных временных профилей коэффициентов усиления находить степень фотодиссоциации молекул  $F_2$ , являющуюся важным параметром, определяющим работу импульсного химического  $DF-CO_2$ -лазера; 4) прогнозировать характеристики усиления среды в зависимости от состава, давления рабочих смесей и параметров инициирования. Прогнозируемые коэффициенты усиления в смесях оптимального состава при давлении смесей 2.5 атм, степени диссоциации молекул  $F_2$  за вспышку ~1% и длительности вспышки на полувысоте ~3 мкс составляют ~7  $m^{-1}$ .

Ключевые слова: DF-CO2-лазер, коэффициент усиления, моделирование.

В работах [1-3] мы предложили использовать активную среду химического DF-CO2-лазера для усиления коротких (~1 пс) импульсов излучения десятимикронного диапазона. Привлекательной чертой этой системы является возможность получения высоких коэффициентов усиления и большой запасаемой энергии в полосе усиления рабочего перехода. В работе [4] мы измерили коэффициенты усиления в активной среде химического DF-CO2-лазера на линии P(20) десятимикронной полосы молекулы CO<sub>2</sub>. Исходное давление смесей составляло 1, 1.5, 2, 2.5 атм, содержание  $F_2 - 7\%$ , 10% и 15%,  $D_2 - 5\%$ ,  $CO_2 - 35\%$ , He – 53<sup>°</sup>, 50<sup>°</sup>, 45<sup>°</sup>. Фтор в качестве примеси содержал 0.83<sup>°</sup> кислорода. Одновременно измеряли еще два параметра: задержку пика коэффициента усиления от начала инициирования и ширину временного профиля коэффициента усиления на полувысоте. В настоящей работе проводится численное моделирование указанных характеристик системы, сравнение их с экспериментом и прогнозирование возможностей оптимизации системы. В отличие от большой совокупности расчетов, имеющих дело с энергетикой DF-CO<sub>2</sub>-лазера, здесь мы основное внимание обращаем на усилительные характеристики активной среды при давлении свыше 1 атм.

На основе анализа литературных данных и результатов численного моделирования (см. ниже) выбрана следующая схема химических и релаксационных процессов, протекающих в активной среде DF-CO<sub>2</sub>-лазера:

В.Я.Агроскин, Б.Г.Бравый, Г.К.Васильев, С.А.Каштанов, Е.Ф.Макаров, С.А.Сотниченко, Ю.А.Чернышев. Институт проблем химической физики РАН, Россия, Московская обл., 142432 Черноголовка, просп. Акад. Семёнова, 1; e-mail: bgbrav@icp.ac.ru, sasotnik@icp.ac.ru, chern@icp.ac.ru

Поступила в редакцию 24 мая 2013 г., после доработки – 12 июля 2013 г.

$$F_2 + hv \to 2F, \tag{1}$$

$$F + D_2 \rightarrow DF(v) + D, \qquad (2)$$

$$D + F_2 \rightarrow DF(v) + F,$$
 (3)

$$D + O_2 + M \to DO_2 + M, \tag{4}$$

$$DF(v = 1) + DF(v = 0) \rightarrow 2DF(v = 0),$$
 (5)

$$DF(v = 1) + CO_2(00^00) \leftrightarrow DF(v = 0) + CO_2(00^01),$$
 (6)

$$CO_2(00^01) + M \rightarrow CO_2(11^10) + M,$$
 (7)

$$CO_2(01^{1}0) + M \rightarrow CO_2(00^{0}0) + M,$$
 (8)

$$CO_2(10^00) + M \leftrightarrow CO_2(02^20) + M.$$
 (9)

Можно показать, что в условиях экспериментов работы [4] имеют место следующие равновесия: между концентрациями атомов D и F; между асимметричной модой молекул CO<sub>2</sub> и колебательно-возбужденными молекулами DF; между симметричной и деформационной модами CO<sub>2</sub>. С учетом этих равновесий

$$\frac{d[F_2]}{dt} = \frac{d[D_2]}{dt} = -0.5 \frac{d[DF]}{dt} = -W,$$
(10)

$$\frac{\mathrm{d}[\mathrm{O}_2]}{\mathrm{d}t} = -k_4[\mathrm{D}][\mathrm{O}_2][\mathrm{M}],\tag{11}$$

$$\frac{d[D]}{dt}$$

=

## $\frac{\left[2\alpha\beta[F_2]f(t)-k_4[D][O_2][M]+k_3^2[D]^2[F_2](1-[F_2]/[D_2])/k_2[D_2]\right]}{(1+k_3[F_2]/k_2[D_2])}, (12)$

$$\frac{d\varepsilon_2}{dt} = \frac{1.5W_{VV'} - W_{VT}}{[CO_2][1 + 2(\varepsilon_1/\varepsilon_2)^2(1 + 1/\varepsilon_2)\exp(76/T)]},$$
(13)

$$\frac{\mathrm{d}\varepsilon_3}{\mathrm{d}t} = \frac{(\varepsilon_0 - \varepsilon) W - k_5 [\mathrm{DF}]^2 (\varepsilon - \varepsilon^0) - W_{\mathrm{VV}'}}{[\mathrm{CO}_2] + (\varepsilon/\varepsilon_3)^2 [\mathrm{DF}] \exp(802/T)},$$
(14)

$$T = 300 + (Q[DF] - q\varepsilon[DF]) - (q_1\varepsilon_1 + 2q_2(\varepsilon_2 - 0.0425) + q_3\varepsilon_3)[CO_2])/c.$$
 (15)

Эти уравнения должны быть дополнены уравнениями равновесия:

 $\varepsilon = [(1 + 1/\varepsilon_3)\exp(802/T) - 1]^{-1}, \tag{16}$ 

$$\varepsilon_1 = [(1 + \varepsilon_2)^2 \exp(76/T) - 1]^{-1}, \tag{17}$$

$$\varepsilon^0 = [\exp(4182/T) - 1]^{-1}.$$
(18)

Здесь f(t) задает форму инициирующего импульса; a степень диссоциации молекул F<sub>2</sub> за импульс;  $\beta$  – поправочный множитель (см. ниже);  $\varepsilon$ ,  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_3$  – текущие значения среднего запаса колебательных квантов на молекулах DF и в симметричной и асимметричной модах молекул СО<sub>2</sub> соответственно; є2 принимается равным половине текущего значения среднего запаса колебательных квантов в деформационной моде молекул СО2 (вводится для удобства записи уравнений);  $\varepsilon^0$  – равновесное значение среднего запаса колебательных квантов на молекулах DF в момент времени t;  $\varepsilon_0 = 4.6$  – исходное значение среднего запаса колебательных квантов на образующихся в реакциях (2) и (3) молекулах DF; Q = 64.2 ккал/моль – тепловой эффект реакции фтора с дейтерием в расчете на молекулу DF; q =8.31, q<sub>1</sub> = 3.97, q<sub>2</sub> = 1.91, q<sub>3</sub> = 6.72 ккал/моль – энергии колебательных квантов DF и в симметричной, деформационной и асимметричной модах молекул СО2 соответственно; с – теплоемкость смеси; [...] – концентрации частиц в 1/см<sup>3</sup>;  $W = k_3[D][F_2]$ ;  $W_{VV'} = k_7[CO_2][M][(1 + \varepsilon_1)(1 + \varepsilon_2)\varepsilon_3]$  $-\varepsilon_1\varepsilon_2(1 + \varepsilon_3)\exp(-392/T)$ ];  $W_{VT} = k_8[CO_2][M]\varepsilon_2[1 - (1 + 1/\varepsilon_2)]$  $\times \exp(-960/T)$ ].

Константы скоростей процессов V–V'- и V–Т-передачи энергии связаны с временами  $\tau$  колебательной релаксации следующими соотношениями:  $k_7[M] = (p\tau_{VV}^M)^{-1}$ ,  $k_8[M] = (p\tau_{VT}^M)^{-1}$ . В уравнениях присутствуют численные параметры (в градусах Кельвина): 76 – дефект резонанса процесса обмена (9), 802 – дефект резонанса процесса обмена (6), 392 – дефект энергии процесса (7), 960 – дефект энергии процесса (8); 4182 – энергия колебательного кванта молекулы DF; 0.0425 – величина  $\varepsilon_2$  при начальной (комнатной) температуре.

В расчетах использовались следующие данные:

$$k_2 = 2.66 \times 10^{-10} \exp(-1970/RT) \text{ cm}^3 \cdot \text{c}^{-1} \text{ [5]};$$

$$k_3 = 1.13 \times 10^{-10} \exp(-2460/RT) \text{ cm}^3 \cdot \text{c}^{-1} [5]$$

 $k_4(300 \text{ K}) = 1.7 \times 10^{-32} \text{ см}^6 \cdot \text{c}^{-1} (\text{M} = \text{He}), 15.9 \times 10^{-32} \text{ см}^6 \cdot \text{c}^{-1} (\text{M} = \text{CO}_2), 7.1 \times 10^{-32} \text{ см}^6 \cdot \text{c}^{-1} (\text{M} = \text{D}_2), 31.1 \times 10^{-32} \text{ см}^6 \cdot \text{c}^{-1} (\text{M} = \text{F}_2) [6] (использовалось соотношение <math>k_4(T) = k_4(300 \text{ K})300/T);$ 

$$k_5 = 2 \times 10^{-10}/T + 2.326 \times 10^{-22} T^{2.96} \text{ cm}^3 \text{c}^{-1} [5];$$

$$\begin{split} (p\tau_{\rm VV}^{\rm He})^{-1} &= \exp(15.995 - 236.107 T^{-1/3} + 736.685 T^{-2/3}); \\ (p\tau_{\rm VV}^{\rm CO_2})^{-1} &= \exp(25.409 - 351.419 T^{-1/3} + 1151.264 T^{-2/3}); \\ (p\tau_{\rm VV}^{\rm D_2})^{-1} &= \exp(-0.55 - 5.253 T^{-1/3}); \\ (p\tau_{\rm VV}^{\rm DF})^{-1} &= (0.182 - 390.967 T^{-1.47})^{-1}; \\ (p\tau_{\rm VT}^{\rm He})^{-1} &= \exp(-0.947 + 59.465 T^{-1/3} - 307.632 T^{-2/3}); \\ (p\tau_{\rm VT}^{\rm CO_2})^{-1} &= \exp(8.461 - 109.177 T^{-1/3} + 267.152 T^{-2/3}); \\ p\tau_{\rm VT}^{\rm D_2} &= 0.072, \end{split}$$

где  $p\tau$  даны в мкс атм. Зависимости  $(p\tau_{VV}^{M})^{-1}$  и  $(p\tau_{VT}^{M})^{-1}$  от температуры в интервале 300–650 К являются результатом проведенного нами усреднения известных литературных данных.

Использованный в экспериментах работы [4] инициирующий импульс задавался в виде  $f(t) = 0.51t^4 \exp(-1.65t)$ , где *t* измеряется в мкс, а длительность на полувысоте составляет 2.88 мкс.

В DF-CO<sub>2</sub>-усилителях большой апертуры из-за поглощения инициирующего света молекулярным фтором возникает неоднородность инициирования по сечению реактора. В расчетах это обстоятельство принималось во внимание. В табл.1 приведены расчетные поправочные коэффициенты  $\beta$ , учитывающие изменение степени диссоциации молекул F<sub>2</sub> в зоне измерений [4] в зависимости от содержания F<sub>2</sub> в смеси и давления смеси.

Решая систему уравнений (10)-(18), получали зависимости  $\varepsilon_1(t), \varepsilon_2(t), \varepsilon_3(t), T(t)$ , используя которые находили временной профиль коэффициента усиления на линии P(20) десятимикронной полосы излучения молекулы CO<sub>2</sub> при зондировании им активной среды DF-CO<sub>2</sub>-лазера. Основной вклад в коэффициент усиления, естественно, дает переход Р(20) полосы 0001-1000. Инверсия населенностей уровней, ответственных за этот переход,  $\Delta N(t) = N_{\rm u}(t)$  –  $(g_u/g_{low})N_{low}(t)$ , где  $N_u(t) = n_{001}(t)r_{j=19}(t)[CO_2]$  и  $N_{low}(t) =$  $n_{100}(t)r_{i=20}(t)$ [CO<sub>2</sub>] – текущие населенности верхнего (00<sup>0</sup>1, j = 19) и нижнего (10<sup>0</sup>0, j = 20) состояний;  $g_u, g_{low}$  – статвеса этих состояний;  $n_{001}(t) = \varepsilon_3(t)/[(1 + \varepsilon_1(t))(1 + \varepsilon_2(t))^2(1 + \varepsilon_2(t))^2(1$  $\varepsilon_3(t))^2$ ] и  $n_{100}(t) = \varepsilon_1(t)/[(1 + \varepsilon_1(t))^2(1 + \varepsilon_2(t))^2(1 + \varepsilon_3(t))] - доли$ населенности колебательных состояний  $00^{01}$ ,  $10^{00}$ ;  $r_{i=19}(t)$ ,  $r_{i=20}(t)$  – доли населенности вращательных состояний с j =19, 20;  $r_i = (2j + 1)(300/TQ_r)\exp(-Bhcj(j + 1)/kT)$ . Вращательная постоянная B = 0.387 см<sup>-1</sup>, а вращательная статсумма  $Q_r =$ 267 при 300 К. Коэффициент усиления в центре линии  $\sigma(v_0)$ × $\Delta N(t)$ , где  $\sigma(v_0) = \{8\pi^2 v_0 d^2 / [3hc(\Delta v)_{1/2}]\}[(j+1)/(2j+1)]$ сечение вынужденного излучения на переходе; v<sub>0</sub> - частота перехода (см<sup>-1</sup>);  $(\Delta v)_{1/2}$  – полуширина линии перехода на полувысоте;  $d = 3.83 \times 10^{-20}$  ед. CGSE – дипольный мо-

Табл.1. Зависимость коэффициента <br/>  $\beta$ от содержания  $\mathrm{F}_2$ и давления смеси.

Содержание F <sub>2</sub> в смеси (%)	Коэффициент β Давление смеси (атм)			
	7	1	0.955	0.913
10	0.962	0.902	0.845	0.799
15	0.902	0.822	0.754	0.693

мент перехода [7]; *j* = 19 – номер вращательного уровня верхнего состояния перехода.

Полуширину спектральной линии на полувысоте вычисляли по формуле  $(\Delta v)_{1/2} = \gamma p (300/T)^m$ , где p – давление газа (атм);  $\gamma$  – полуширина линии на полувысоте при давлении 1 атм и температуре 300 К (см<sup>-1</sup>/атм). Обычно считается, что m = 0.75 (см., напр., [8]). Тогда  $(\Delta v)_{1/2} \sim (T/300)^{0.25}$ , поскольку  $p \sim T/300$ . При расчётах предполагалось, что  $\gamma = 0.1$  см<sup>-1</sup>/атм для столкновений CO<sub>2</sub> с молекулами CO<sub>2</sub> [7] и 0.07 см<sup>-1</sup>/атм для столкновений CO<sub>2</sub> с остальными молекулами.

При определенных условиях (высокий уровень колебательного возбуждения молекул CO<sub>2</sub>, большие давления) определенный вклад в усиление будут давать линии, расположенные вблизи линии P(20). В расчетах учитывали вклад линий P(17) и P(19) полосы  $00^{0}2-10^{0}1$  с частотами 944.57 и 942.81 см<sup>-1</sup> соответственно и линий R(21), R(22), R(23), R(24), R(25) полосы  $01^{1}1-11^{1}0$  с частотами 942.9, 943.41, 944.2, 944.67, 945.47 см<sup>-1</sup> соответственно. В условиях экспериментов [4] вклад «горячих» полос в коэффициент усиления по расчетам может достигать 20%.

Из временного профиля коэффициента усиления находили задержку пика профиля от начала инициирования  $t_{del}$ , ширину профиля на полувысоте  $t_{1/2}$  и коэффициент усиления *K* в пике профиля.

На рис.1 представлены расчетные временные зависимости различных характеристик активной среды для смеси  $F_2(10\%) + D_2(5\%) + O_2(0.083\%) + CO_2(35\%) + He (49.9\%)$ при давлении 2.5 атм. Там же приведен профиль интенсивности инициирующей вспышки.

Профиль коэффициента усиления (кривая 2) формируется рядом процессов, изменяющих населенности верхних



Рис.1. Временные зависимости интенсивности инициирующей вспышки (1), коэффициента усиления (2), относительной концентрации молекул DF (отнесена к концентрации DF в момент максимума коэффициента усиления) (3), относительной населенности состояния ( $00^{0}1, j = 19$ ) (увеличена в 100 раз) (4), температуры среды (5), среднего запаса колебательных квантов  $\varepsilon_3$  в асимметричной моде (6), половины среднего запаса колебательных квантов  $\varepsilon_2$  в деформационной моде (7), относительной населенности состояния (10<sup>0</sup>0, *j* = 20) (увеличена в 100 раз) (8), среднего запаса колебательных квантов *ε*<sub>1</sub> в симметричной моде (9). Состав смеси при давлении 2.5 атм:  $F_2 (10\%) + D_2 (5\%) + O_2 (0.083\%) + CO_2 (35\%) + He$  $(49.9\%); \alpha = 0.75\%$ . Кривые 1, 2, 5 нормированы на максимальные значения. Параметры:  $t_{del} = 3.2$  мкс,  $t_{1/2} = 1.37$  мкс, K = 6.18 м<sup>-1</sup>; температура и степень превращения D2 в пике профиля коэффициента усиления равны 460.5 К и 0.215 соответственно. Доля энергии вспышки, выделившаяся к моменту, который отвечает пику коэффициента усиления, составляет 60%.

и нижних уровней переходов, дающих вклад в усиление. На восходящей части профиля доминирующую роль играет рост населенности верхних уровней переходов изза увеличения среднего запаса колебательных квантов  $\varepsilon_3$  в асимметричной моде молекулы CO<sub>2</sub> (кривая 6) вследствие ускоряющейся наработки молекул DF (кривая 3) в реакции (3). На нисходящей части профиля основную роль играют процессы уменьшения населенности верхних и увеличения населенности нижних уровней переходов.

На рис.1 для иллюстрации приведен временной ход населенности верхнего ( $00^{0}1, j = 19$ ) (кривая 4) и нижнего  $(10^{0}0, j = 20)$  (кривая 8) уровней перехода P(20) полосы 00°1-10°0, дающего основной вклад в коэффициент усиления активной среды. Спад населенности верхних уровней происходит по двум причинам – из-за разогрева среды и VV'-релаксации. При образовании молекулы DF 40% энергии реакции сразу идет на поступательные степени свободы. Дефект резонанса в процессе быстрой передачи энергии (6) колебательно-возбужденной молекулы DF молекуле СО<sub>2</sub> приводит к увеличению этой доли энергии до 52%. Вклад в разогрев среды дает и колебательная релаксация молекул СО2. Вследствие быстрого процесса VT-релаксации (8) с M = He распределение населенности по колебательным уровням деформационной моды близко к равновесному и определяется поступательной температурой. С увеличением температуры растет  $\varepsilon_2$ , и населенность всех состояний с нулевым колебательным уровнем деформационной моды падает как  $1/(1 + \varepsilon_2)^2$ . С ростом  $\varepsilon_2$ уменьшается и населенность уровня ( $00^{0}1, j = 19$ ) (кривая 4), что и является в конечном итоге причиной падения коэффициента усиления (напомним, что переход (00°1, j = 19) – (10<sup>0</sup>0, j = 20) дает основной вклад в коэффициент усиления активной среды). Дополнительное падение коэффициента усиления происходит из-за VV'-релаксации, снижающей населенность верхних уровней переходов, участвующих в усилении, и роста населенности уровня  $(10^{0}0, j = 20)$  (кривая 8) вследствие увеличения среднего запаса колебательных квантов  $\varepsilon_1$  в симметричной моде (кривая 9).

Если обратиться к рис.1, то видно, что населенность уровня ( $00^{0}1$ , j = 19) (кривая 4) начинает заметно снижаться, хотя средний запас колебательных квантов  $\varepsilon_3$  в асимметричной моде молекул CO<sub>2</sub> продолжает расти (кривая 6). При этом населенность нижнего уровня ( $10^{0}0$ , j = 20) (кривая 8) повышается не столь заметно. Все это говорит о том, что главную роль в уменьшении коэффициента усиления в условиях расчетов играет спад населенности уровня ( $00^{0}1$ , j = 19) из-за повышения температуры среды. Об этом свидетельствует и практически одновременное достижение максимумов кривых 2 и 4.

Расчеты показали, что значения задержек достижения пиков коэффициента усиления от начала инициирования  $t_{del}$  и ширин профиля коэффициента усиления на полувысоте  $t_{1/2}$  слабо зависят от скорости VV'-релаксации при ее изменении в разумных пределах. Так, например, для смеси  $F_2 (10\%) + D_2 (5\%) + O_2 (0.083\%) + CO_2 (35\%) + He (49.9\%)$  при давлении 2.5 атм формальное увеличение суммарной скорости VV'-процессов в два раза (отметим, что возможное увеличение суммарной скорости VV'-релаксации за счет не учитываемых в схеме процессов вряд ли выходит за эти рамки) приводит к уменьшению  $t_{del}$  на 6.5%, 5% и 3.4% при степени диссоциации  $\alpha$  молекул  $F_2$ , равной 0.375%, 0.75% и 1.5% соответственно. При этом параметр  $t_{1/2}$  уменьшается на 8.5%, 7.3% и 6% соответственно. В то же

время при таком увеличении скорости релаксации коэффициент усиления для всех указанных степеней диссоциации уменьшается на 1.67 м<sup>-1</sup>, т.е. при длине активной среды 1 м усиление падает заметно – примерно в пять раз.

Можно заключить, что параметры  $t_{del}$  и  $t_{1/2}$  фактически зависят лишь от условий проведения экспериментов – от состава и давления смесей, а также от степени диссоциации молекул  $F_2$ . Тогда сопоставление рассчитанных значений этих параметров с экспериментальными значениями позволит найти величину  $\alpha$ . Если схема VV'процессов выбрана корректно, то рассчитанные коэффициенты усиления, отвечающие найденному значению  $\alpha$ , не должны сильно отличаться от экспериментальных.

Удовлетворительное согласие расчетных и экспериментальных [4] данных для параметров  $t_{del}$  и  $t_{1/2}$  было достигнуто при  $\alpha = 0.75$ %. На рис.2, *а* и б в качестве примера приведены расчетные и экспериментальные значения параметров  $t_{del}$  и  $t_{1/2}$  для смеси  $F_2$  (10%) +  $D_2$  (5%) +  $O_2$ (0.083%) + CO<sub>2</sub> (35%) + Не (49.9%) в диапазоне давлений 1–2.5 атм, на рис.2, *в* – рассчитанные при  $\alpha = 0.75\%$  и экспериментальные значения коэффициентов усиления для той же смеси. Видно, что для коэффициентов усиления расчетные данные несколько превышают экспериментальные, однако максимальное расхождение между ними составляет не более 20%. Представляется, что в целом расчетные данные приемлемо согласуются с экспериментальными. Это говорит о том, что схема процессов (1)-(9) и соответствующая ей система уравнений (10)-(18) адекватны при описании накачки молекул СО2 в химическом



Рис.2. Зависимости задержки пика коэффициента усиления от начала инициирования (*a*), ширины профиля коэффициента усиления на полувысоте ( $\delta$ ), а также коэффициента усиления в пике профиля (*b*) от давления смеси  $F_2(10\%) + D_2(5\%) + O_2(0.083\%) + CO_2(35\%) + He (49.9\%)$  при длительности вспышки на полувысоте 2.88 мкс,  $\alpha = 0.75\%$ . Точки – экспериментальные данные [4], сплошные кривые – расчет.

DF-CO<sub>2</sub>-лазере и, следовательно, систему (10)–(18) можно использовать для оптимизации характеристик усиления в зависимости от состава рабочих смесей и параметров инициирования.

Отметим, что на выбор состава смесей влияет ряд чисто практических соображений. Использование активной среды DF–CO<sub>2</sub>-лазера для усиления коротких импульсов наиболее перспективно, начиная с исходного давления 2–2.5 атм [3]. Для усилителей с большой апертурой, работающих при таком давлении, доля  $F_2$  вряд ли может быть сделана больше 10% из–за возникновения сильной неоднородности инициирования по сечению реактора.

С увеличением содержания  $D_2$  пропорционально растет конечная температура продуктов реакции, а значит и давление в реакторе после взрывного превращения. В связи с этим становятся актуальными проблемы прочности реактора и его окон. В то же время коэффициент усиления при доле  $D_2$  свыше 5% растет не слишком сильно. С практической точки зрения можно ограничиться пятипроцентным содержанием дейтерия в смеси.

Как показывают расчеты, для получения максимально возможных коэффициентов усиления следует уменьшать содержания кислорода в смеси. Известно, что реакция фтора с дейтерием протекает по механизму с энергетическим разветвлением:  $DF(v) + D_2(v') \rightarrow DF(v-1) + D_2(v'+1)$ ,  $D_2(v) + F_2 \rightarrow D + F + DF$ . Молекулы  $O_2$  уменьшают длину цепи за счет процесса тримолекулярного обрыва (4), и при достаточной концентрации О2 смеси становятся стабильными. При добавлении в смесь молекул СО2 разветвление вообще может быть подавлено: колебательная энергия молекул DF переходит на молекулы CO2 и теряется из-за VTрелаксации. В этом случае для стабилизации приготавливаемых смесей достаточно лишь небольшого количества кислорода. Наши опыты показали, что при содержании О2 в смесях, равном 0.083%, смеси стабильны во всем использованном диапазоне давлений. В то же время дальнейшее уменьшение содержания кислорода, по расчетам, не приводит к существенному увеличению усиления среды.

Из расчетов следует, что для каждой степени диссоциации  $\alpha$  молекул F<sub>2</sub> существует оптимальное содержание CO<sub>2</sub> в смеси. С увеличением  $\alpha$  оптимальное содержание CO<sub>2</sub> растет. На рис.3 представлены зависимости *K* от доли CO<sub>2</sub> в смеси при  $\alpha = 0.75\%$  и 1.5%. Этим значениям  $\alpha$  от-



Рис.3. Зависимости коэффициента усиления от доли CO<sub>2</sub> в смеси  $F_2(10\%) + D_2(5\%) + O_2(0.083\%) + CO_2(x\%) + He ((84.9 - x)\%)$  при давлении 2.5 атм и длительности вспышки на полувысоте 2.88 мкс;  $\alpha = 0.75\%$  (*I*) и 1.5% (*2*).



Рис.4. Зависимость коэффициента усиления от степени диссоциации молекул  $F_2$  для смеси  $F_2$  (10%) +  $D_2$  (5%) +  $O_2$  (0.083%) +  $CO_2$  (50%) + He (34.9%) при давлении 2.5 атм и длительности вспышки на полувысоте 2.88 мкс.

вечают оптимальные содержания CO2, равные 50% и 60% соответственно.

На рис.4 и 5 приведены зависимости коэффициентов усиления от степени диссоциации молекул  $F_2$  и длительности вспышки. Видно, что сокращение длительности вспышки приводит к эффективному увеличению коэффициента усиления. Из данных рис.3–5 следует, что в активной среде DF–CO<sub>2</sub>-лазера с исходным давлением рабочей смеси оптимального состава 2.5 атм при реалистичных значениях параметров инициирования (степень диссоциации молекул  $F_2$  равна ~1%, длительность вспышки на полувысоте составляет ~3 мкс) коэффициенты усиления излучения десятимикронного диапазона могут достигать ~7 м<sup>-1</sup>. Величина запасаемой энергии в полосе усиления пикосекундного импульса в этих условиях достигает ~50 Дж/л.

Суммируя сказанное, можно заключить: упрощенная схема химических и релаксационных процессов (2)–(9) адекватно описывает усиление излучения десятимикронного диапазона активной средой химического DF–CO<sub>2</sub>-лазера; сопоставление экспериментально измеренных и



Рис.5. Зависимость коэффициента усиления от длительности вспышки для смеси  $F_2$  (10%) +  $D_2$  (5%) +  $O_2$  (0.083%) +  $CO_2$  (50%) + He (34.9%) при давлении 2.5 атм и  $\alpha$  = 0.75%.

рассчитанных по этой схеме задержек пика коэффициента усиления от начала инициирования и ширин профиля коэффициента усиления на полувысоте позволяет определить степень диссоциации молекул F<sub>2</sub>, которая является важным параметром, характеризующим работу химического DF-CO<sub>2</sub>-лазера. Прогнозируемые коэффициенты усиления превышают 7 м<sup>-1</sup>.

- Bravy B.G., Vasiliev G.K. Proc. Int. Conf. Lasers'99 (McLean, VA: STS Press, 2000, p. 300).
- Bravy B.G., Vasiliev G.K., Makarov E.F., Chernyshev Yu.A. Proc. SPIE Int. Soc. Opt. Eng., 4747, 1 (2002).
- Bravy B.G., Vasiliev G.K., Gordienko V.M., Makarov E.F., Panchenko V.Ya., Platonenko V.T., Chernyshev Yu.A. *Opt. Express*, 20, 25536 (2012).
- Агроскин В.Я., Бравый Б.Г., Васильев Г.К., Каштанов С.А., Макаров Е.Ф., Сотниченко С.А., Чернышев Ю.А. Квантовая электроника, 42, 874 (2012).
- 5. *Химические лазеры*. Под ред. Р. Гросса и Дж. Ботта (М.: Мир, 1980, с. 97).
- 6. Breashears W.D. et al. JCS Far. Trans., 87, 2337 (1991).
- Rothman L.S., Gordon I.E., et al. J. Quant. Spectr. Rad. Trans., 110, 533 (2009).
- 8. Rosenmann L., Hartmann J.M., et al. Appl. Opt., 27, 3902 (1988).