

УДК 621.378.33

## ИЗМЕНЕНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ В СМЕСИ $CO-N_2$ ПРИ СИЛЬНОМ ОТКЛОНЕНИИ ОТ РАВНОВЕСНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

С. Ю. Пичугин

*В существенно неравновесных условиях исследовано изменение средних запасов колебательных квантов  $CO$  и  $N_2$  при возбуждении электрическим разрядом смеси  $CO-N_2$ .*

В настоящее время весьма актуальным является исследование колебательной кинетики в многокомпонентных газовых средах в условиях, когда запас колебательной энергии существенно превышает равновесный (режим "сильного" отклонения от равновесия) [1]. В частности, данный режим характерен для работы молекулярных лазеров, возбуждаемых электрическим разрядом, например,  $CO$  лазера на смеси  $CO-N_2$ . Обычным методом в этом случае является численное решение системы большого числа уравнений для населенностей колебательных уровней молекул газовой смеси. В связи с этим представляет интерес рассмотреть в режиме "сильного" отклонения от равновесия изменение только колебательной энергии каждой компоненты смеси. Тогда анализ колебательной кинетики существенно упрощается, поскольку достаточно решить уравнения лишь для средних запасов колебательных квантов в нескольких колебательных модах. Этому посвящена настоящая статья, где исследуется динамика изменения колебательной энергии (среднего запаса колебательных квантов)  $CO$  и  $N_2$  при возбуждении электрическим разрядом смеси  $CO-N_2$ .

Рассмотрим смесь  $CO-N_2$ , возбуждаемую электрическим разрядом, где концентрация азота  $N_N$  во много раз превышает концентрацию окиси углерода  $N_{CO}$ , что характерно, например, для смесей  $CO$  лазера. Функция распределения молекул  $CO$  по колебательным уровням  $f_i = N_i/N_{CO}$  приблизительно совпадает с триноровской функцией распределения  $f_i^T$  для  $i \leq n_0$ , где  $n_0 = E_1 T / 2 \Delta E_1 T_1 + 0,5$  [1]. Здесь  $E_1$ ,  $\Delta E_1$  и

$T_1$  – энергия первого колебательного уровня, ангармоничность и колебательная температура нижних уровней молекул  $CO$ ,  $T$  – температура газовой смеси. При  $i \geq n_0$  выражение для  $f_i$  в исследуемой смеси можно найти, интегрируя уравнение (4.6) гл. 4 в [1] с заменой в нем  $P_{10}\exp(\delta_{VT}i)$  на  $[P_{10}\exp(\delta_{VT}i) + Q_{12}\exp(-\delta_{VT}i)]N_N/N_{CO}$ , где  $P_{10}$  и  $Q_{12}$  – константы скорости процессов соответственно колебательно-поступательного и колебательно-колебательного обмена  $CO(1) + N_2(O) \rightarrow CO(0) + N_2(O)$  и  $CO(1) + N_2(O) \rightarrow CO(0) + N_2(1)$ , член  $\delta_{VT}$  учитывает влияние ангармоничности на вероятности данных процессов на более высоких уровнях. Получаем тогда следующее приближенное выражение для  $f_i$ , верное при  $n_0 \leq i \leq n_i$ :

$$f_i = \frac{1}{i+1} \left\{ \Gamma_i - \frac{a\delta_{VV}^3 kT}{12\delta_{VT}Q_{10}\Delta E_1} [P_{10}\exp(\delta_{VT}i) + Q_{12}\exp(-\delta_{VT}i)] \right\}. \quad (1)$$

Здесь  $Q_{10}$  и  $\delta_{VV}$  – константа скорости процесса  $CO(1) + CO(0) \rightarrow CO(0) + CO(1)$  и член, учитывающий влияние ангармоничности на вероятности  $VV$ -обмена между молекулами  $CO$ ,  $a = N_N/N_{CO}$ . Значения  $n_i$  и  $\Gamma_i$  находятся с учетом (1) из условий  $f_{n_0} = f_{n_0}^T/e^{1/2}$  и  $f_{n_1} = 0$ , где  $f_{n_0}^T = f_0\exp(-n_0^2\Delta E_1/kT)$ . Величина  $f_0$  находится из условия нормировки функции распределения  $f_i$ :  $\sum_{i=0}^{n_1} f_i = 1$ :

$$f_0 = \{(1 - x_1)^{-1} + e^{-1/2}\exp(-n_0^2\Delta E_1/kT)(n_0 + 1)\ln[(n_1 + 1)/(n_0 + 1)]\}^{-1}.$$

Для описания изменения средних запасов  $\alpha$  колебательных квантов, приходящихся на одну молекулу  $CO$  ( $\alpha_1$ ) и  $N_2$  ( $\alpha_2$ ) в смеси  $CO-N_2$ , возбуждаемой электрическим разрядом, запишем уравнения:

$$N_{CO} \frac{d\alpha_1}{dt} = \epsilon_1 W_1 f_0 [1 - \exp(E_1/kT_e - E_1/kT_1)] - G_{VT} + G_{VV}, \quad (2)$$

$$N_N \frac{d\alpha_2}{dt} = \epsilon_2 W_2 (1 - x_2) [1 - \exp(E_2/kT_e - E_2/kT_2)] - G_{VV} - P_N N_N^2 x_2 (1 - x_2) / (1 - x_2 \exp(\delta_2))^2. \quad (3)$$

Здесь  $W_1$  и  $W_2$  – суммарная удельная скорость накачки молекул  $CO$  и  $N_2$  в электрическом разряде:  $W_1 = k_1(T_e)N_{CO}N_e$ ,  $W_2 = k_2(T_e)N_NN_e$ , где  $k_1$  и  $k_2$  – суммарные константы скоростей процессов соответственно  $CO(0) + e \rightarrow CO(v) + e$  и  $N_2(0) + e \rightarrow N_2(v) + e$ ;  $N_e$  и  $T_e$  – концентрация и температура свободных электронов в ходе газового разряда в смеси  $N_2-CO$ ;  $\epsilon_1$  и  $\epsilon_2$  – среднее число колебательных квантов, приобретаемых молекулами  $CO$  и  $N_2$  в одном элементарном акте накачки;  $P_N$  – константа скорости процесса

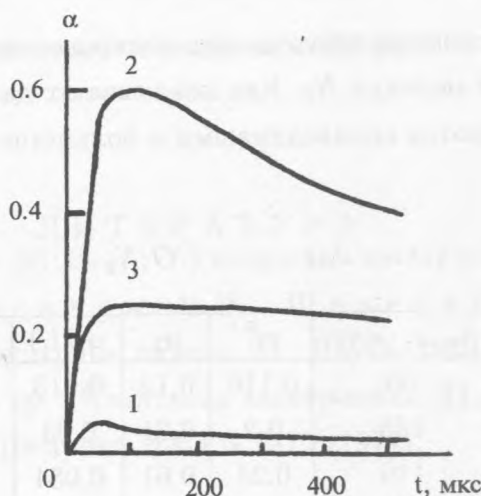


Рис. 1. Расчетные временные зависимости средних запасов  $\alpha$  колебательных квантов молекул  $N_2$  (1),  $CO$  (2) и запаса квантов на нижних колебательных уровнях  $CO$  (3) в смеси  $CO:N_2=1:10$  с температурой 140 К, возбуждаемой электрическим разрядом с длительностью 50 мкс при концентрации электронов  $10^{12} \text{ см}^{-3}$ .

$VT$ -релаксации  $N_2(1) + N_2 \rightarrow N_2(0) + N_2$ ,  $x_i = \exp(-E_i/kT_i)$ ;  $E_2$  и  $T_2$  – соответственно энергия первого колебательного уровня и колебательная температура  $N_2$ ; величины  $\delta_1$  и  $\delta_2$  учитывают влияние ангармоничности на вероятность колебательно-колебательного обмена между молекулами  $CO$  и  $N_2$ . Для членов  $G_{VT}$  и  $G_{VV}$  в (2) – (3) можно взять следующие выражения [1]:

$$G_{VT} = 6N_{CO}^2 Q_{10} \Delta E_1 (n_0 + 1)^2 (f_{n_0})^2 / (\delta_{VV}^3 kT), \quad (4)$$

$$G_{VV} = \frac{N_{CO} N_N Q_{12} (1 - x_1)(1 - x_2)[x_1 - \exp(E_2/kT - E_1/kT)x_2]}{[1 - x_1 \exp(-\delta_1)]^2 [1 - x_2 \exp(\delta_2)]^2}. \quad (5)$$

Здесь  $Q_{10}$  и  $\delta_{VV}$  – константа скорости процесса  $CO(1) + CO(0) \rightarrow CO(0) + CO(1)$  и член, учитывающий влияние ангармоничности на вероятности  $VV$ -обмена между молекулами  $CO$ ;  $Q_{12}$  – константа скорости процесса колебательно-колебательного обмена  $CO(1) + N_2(0) \rightarrow CO(0) + N_2(1)$ . Связь между величинами  $\alpha_1$  и  $T_1$  задается соотношением [1]:

$$\alpha_1 = \alpha_1^0 + e^{-1/2} f_0 (n_0 + 1) (n_1 - n_0) \exp(-n_0^2 \Delta E_1 / kT),$$

где  $\alpha_1^0 = [\exp(E_1/kT_1) - 1]^{-1}$  – средний запас колебательных квантов на нижних уровнях  $CO$ , соответствующий значению  $\alpha_1$  при малом отклонении от равновесного распределения. Уравнения (2) – (3) и выражения (4), (5) записаны в предположении "сильного".

отклонения от равновесного колебательного распределения для молекул  $CO$  и "умеренного" отклонения – для молекул  $N_2$ . Как показывают дальнейшие численные расчеты, эти допущения оказываются справедливыми в большинстве случаев.

Т а б л и ц а 1

Результаты расчетов для смеси  $CO:N_2=1:10$ ,  $T=140$  K,  $t_i = 50$  мкс

$N_e, \text{ см}^{-3}$	$t_{max}, \text{ мкс}$	$\alpha_1^0$	$\alpha_1$	$\alpha_2(t_i)$	$T_1, \text{ K}$	$T_2(t_i), \text{ K}$
$2 \cdot 10^{11}$	50	0,116	0,12	0,013	1364	777
$5 \cdot 10^{11}$	165	0,2	0,31	0,03	1709	952
$1 \cdot 10^{12}$	110	0,24	0,61	0,054	1892	1129
$1,5 \cdot 10^{12}$	85	0,27	0,85	0,075	1990	1261
$2 \cdot 10^{12}$	65	0,29	1,06	0,095	2061	1371

Конкретные численные расчеты были проведены для смеси  $CO:N_2=1:10$ ,  $N_{CO} = 2,25 \cdot 10^{-6}$  моль/см<sup>3</sup> ( $T = 140$  K), характерной для электроразрядного  $CO$  лазера [2], при длительности возбуждения  $t_i = 50$  мкс ( $E/N = 2 \cdot 10^{-16}$  В · см<sup>2</sup>). Константы скорости колебательного возбуждения молекул  $CO$  и  $N_2$  электронами в данной смеси брались из [3]. В табл. 1 представлены результаты вычислений при различных значениях концентрации электронов газового разряда в среде  $CO-N_2$ , которая полагалась постоянной в течение времени возбуждения. Приведены расчетные максимально достигаемые в момент времени  $t_{max}$  значения  $\alpha_1^0$ ,  $\alpha_1$  и  $T_1$ , а также величины  $\alpha_2$  и  $T_2$  к концу возбуждающего импульса. Зависимости расчетных значений  $\alpha_1^0$ ,  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  от времени при  $N_e = 10^{12}$  см<sup>-3</sup> представлены на рис. 1. Видно, что средний запас колебательных квантов  $CO$  достигает максимального значения спустя некоторое время (100 – 10 мкс) после окончания разряда и величина  $\alpha_1$  существенно превышает запас квантов на нижних уровнях при  $N_e \geq 10^{12}$  см<sup>-3</sup>. При этом интервал колебательных уровней  $n_0 - n_1$  составляет  $\simeq 6 - 35$ . Как известно, при  $\alpha_1^0 \ll \alpha_1$  возможна эффективная работа  $CO$  лазера на переходах  $v \rightarrow v - 1$ , где  $n_0 \leq v < n_1$  [1]. Поэтому можно сделать вывод, что в рассматриваемых условиях для возбуждения лазера на смеси  $CO-N_2$  необходимо создавать концентрацию электронов в разряде  $N_e \sim 10^{12}$  см<sup>-3</sup>.

Таким образом, в данной работе для исследования кинетики колебательного возбуждения молекул смеси  $CO-N_2$  в существенно неравновесных условиях использованы уравнения для средних запасов колебательных квантов  $CO$  и  $N_2$ . На основе полученных уравнений проведены численные расчеты для смеси  $CO:N_2=1:10$ , возбуждаемой электрическим разрядом с длительностью 50 мкс. Представленная методика может быть



использована, в частности, при теоретическом анализе работы *СО* лазеров.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Гордиец Б. Ф., Осипов А. И., Шелепин Л. А. Кинетические процессы в газах и молекулярные лазеры. М., Наука, 1980.
- [2] Казакевич В. С. и др. Квантовая электроника, **21**, 467 (1994).
- [3] Конев Ю. Б. и др. Препринт ИАЭ N 2810 (1977).

Самарский филиал ФИАН

Поступила в редакцию 20 мая 1996 г.