

На правах рукописи

Курносов Александр Константинович

**ТЕОРИЯ ЭЛЕКТРОРАЗРЯДНОГО СО ЛАЗЕРА НА ОСНОВНЫХ И
ОБЕРТОННЫХ ПЕРЕХОДАХ, УЧИТЫВАЮЩАЯ СОВОКУПНОСТЬ
ПРОЦЕССОВ ОДНО- И МНОГОКВАНТОВОГО VV ОБМЕНА**

Специальность 1.3.19 – лазерная физика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Москва, Троицк –2021

Список сокращений и обозначений, используемых в автореферате

КС – константа скорости;

АС – активная среда;

VV обмен – колебательно-колебательный обмен;

VT релаксация – колебательно-поступательный обмен;

Модель МКО – теоретическая модель СО лазера, в которой при описании колебательной кинетики молекул СО в широком диапазоне колебательных уровней учитывается совокупность процессов VV обмена с различным числом обмениваемых квантов;

Модель ОКО – теоретическая модель СО лазера, в которой учитываются лишь процессы одноквантового VV обмена;

ЭИ СО лазер, СО ЭИЛ – электроразрядный СО лазер с несамостоятельным разрядом, поддерживаемым электронным пучком;

КФР – колебательная функция распределения;

ФРЭЭ – функция распределения электронов по энергии;

e-V – процессы колебательного возбуждения/девозбуждения молекул электронами;

КУСС – коэффициент усиления слабого сигнала;

МДР – модуляция добротности резонатора;

I Амага – плотность газа при нормальных условиях.

Общая характеристика работы

Актуальность темы.

Процессы энергообмена с участием колебательно-возбужденных молекул атмосферных газов N_2 , СО, а также O_2 , играют важную роль в природных явлениях и в технологических процессах. Они важны и для описания баланса энергии в земной атмосфере, протекания в ней химических реакций и для задач гиперзвуковой аэродинамики. Среди технологических применений плазмы на первом месте по важности колебательного энергообмена стоят газовые СО и СО₂ лазеры и плазмохимические реакторы. Колебательно-возбужденные молекулы приводят к открытию ряда новых каналов во многих столкновительных процессах с участием нейтральных и заряженных частиц. Например, энергия, запасенная на «средних» и «высоких» колебательных уровнях, может сильно повышать реакционную способность молекул по сравнению с невозбужденными молекулами.

Современное развитие компьютерной техники позволяет моделировать кинетику большого числа $\sim 10^3 \div 10^4$ физико-химических процессов в указанных системах, в том числе с участием колебательно-возбужденных молекул. Однако достоверность результатов кинетических вычислений часто оказывается низкой из-за отсутствия надежных данных о механизме отдельных процессов и низкого класса точности используемых констант скорости (КС) и сечений. Например, разброс данных о КС колебательно-колебательного (VV) обмена между молекулами N_2 достигает одного порядка величины. Для констант скорости VV' обмена между СО и O_2 этот разброс еще больше. Наличие надежных данных о КС и сечениях элементарных процессов колебательного

энергообмена является в настоящее время ключевым условием решения многих актуальных задач физики лазеров и плазмохимии. В свою очередь, для вычислений сечений процессов требуется решение фундаментальной проблемы определения поверхностей потенциальной энергии взаимодействующих систем и совершенствование методов расчетов молекулярной динамики. В настоящее время в расчетах молекулярной динамики широко используется полуклассическое приближение, позволяющее рассчитывать сечения процессов колебательного энергообмена в широком диапазоне энергий, начиная с энергий ≈ 100 К. Одним из объектов, в которых велика роль процессов с участием колебательно-возбужденных молекул CO и N₂, является активная среда (АС) электроразрядных CO лазеров, в которой VV обмен является важнейшим механизмом возникновения инверсии. В классе газовых лазеров такие лазеры остаются перспективными для различных технологических применений.

Сложность и дороговизна экспериментальных исследований электроразрядных CO лазеров повышают востребованность теоретического моделирования, позволяющего выявить закономерности изменения лазерных характеристик при варьировании параметров активной среды и резонатора в значительно более широких пределах, чем это возможно на экспериментальной установке. Одна из проблем, возникающих при этом, заключается в том, что, несмотря на длительную историю экспериментальных и теоретических исследований активной среды данного лазера, колебательная кинетика процессов с участием молекул CO на высоких уровнях оставалась слабо изученной. Разработанные ранее теоретические модели CO лазера учитывали лишь процессы одноквантового VV обмена между молекулами CO. Вероятности этих процессов рассчитывались в простейших приближениях теории рассеяния, что было оправдано лишь для процессов между молекулами на нижних колебательных уровнях v . Однако эти модели удовлетворительно описывали характеристики лазера. Дело в том, что электроразрядный CO лазер обычно работает на переходах между сравнительно низко расположенными уровнями, и в его спектре доминируют переходы с верхними лазерными уровнями $v < 12$. К началу работы над диссертацией отсутствовала надежная информация о механизмах и КС процессов VV и VV' обмена молекул CO на более высоких уровнях. В то же время процессы колебательного энергообмена молекул CO на высоких уровнях играют в ряде случаев важную роль в АС CO лазера. Их корректное описание важно, в частности, для расчетов характеристик CO лазера на обертоном, работающего на переходах между высокими колебательными уровнями $v \rightarrow v-2$ ($v=10 \div 38$). В этом лазере, активно исследуемом в последние 25 лет, удачно сочетаются высокий КПД и попадание значительной части его спектра в окно «прозрачности» атмосферы. Богатый спектр колебательно-вращательных переходов CO лазера на обертоне в диапазоне длин волн (2.5 \div 4.2) мкм интересен для задач спектроскопии, т.к. в нем лежит множество полос молекулярного поглощения различных веществ. По этим же причинам представляют интерес характеристики CO лазера на основных переходах между высокими колебательными уровнями, работающего в спектральном диапазоне (5.4 \div 8.7) мкм. Также надо иметь в виду, что нагрев АС за счет тепловыделения в процессах VV обмена и колебательно-

поступательной (VT) релаксации распределён по широкому интервалу номеров колебательных уровней v . Проблема надежного определения мощности такого нагрева актуальна, т.к. характеристики СО лазера весьма чувствительны к температуре АС.

При описании кинетики молекул СО на высоких колебательных уровнях может потребоваться учет процессов энергообмена электронов с колебательно-возбужденными молекулами. В АС СО лазера колебательная температура молекул СО на высоких уровнях может превышать эффективную температуру электронов в разряде, из-за чего возможна передача колебательной энергии молекул электронам. Современные теоретические модели АС обеспечивают учет взаимодействия двух сильно неравновесных систем: колебательной функции распределения (КФР) молекул и функции распределения электронов по энергии (ФРЭЭ). Для описания процессов энергообмена молекул СО на высоких колебательных уровнях с электронами в разряде необходимо определение сечений и КС указанных процессов и корректное описание колебательной кинетики.

При использовании СО лазеров для разнообразных технологических применений часто требуется высокая энергия и мощность излучения в различных спектральных диапазонах или на отдельных переходах. В связи с этим представляет интерес изучение характеристик частотно-селективного СО лазера в зависимости от ширины и расположения «спектрального окна» резонатора – спектрального диапазона, в котором возможна генерация излучения.

Необходимым этапом создания теоретической модели СО лазера является ее верификация. Сравнение теории и эксперимента по динамике коэффициента усиления слабого сигнала (КУСС) на отдельных колебательно-вращательных переходах, является одним из методов такой верификации. В отличие от энергетических и спектральных характеристик СО лазера, являющихся интегральными, динамика КУСС, измеренная, например, методом лазерного зондирования АС, отслеживает основные этапы возникновения частичной инверсии на выбранном лазерном переходе. Благодаря высокой чувствительности динамики КУСС на переходах между высокими колебательными уровнями к добавкам O_2 в АС оказывается возможным и определение КС VV' обмена между колебательно-возбужденными молекулами СО и молекулами O_2 .

Цели диссертационной работы

При выполнении работы ставились две основные и взаимосвязанные цели.

1) Разработка теоретической модели СО лазера для корректного описания его характеристик в спектральных диапазонах (2.7÷4.2) и (5.4÷8.7) мкм, соответствующих переходам обертона и фундаментальной полосы между высокими колебательными уровнями с $v > 12$. Для достижения этой цели планировалось:

а) В дополнение к рассчитанным ранее константам скорости процессов VV' обмена между молекулами СО выполнить систематические полуклассические вычисления констант скорости VV' обмена между молекулами СО и N_2 , а также между молекулами N_2 .

б) Сформировать полные матрицы рассчитанных в полуклассическом приближении констант скорости процессов одноквантового, многоквантового и асимметричного VV и VV' обмена в смеси $CO:N_2$ и использовать их в кинетических уравнениях для колебательных населенностей молекул в активной среде CO лазера.

в) Верифицировать теоретическую модель CO лазера путем сравнения теории с экспериментальными данными по константам скорости процессов VV и VV' обмена в смеси газов $CO:N_2$ и по характеристикам CO ЭИЛ в широком диапазоне колебательных переходов, параметров активной среды и в различных режимах работы.

2) Использование разработанной модели для решения следующих задач:

а) Исследование характеристик CO лазера на обертоном и основной частоте на переходах между высокими колебательными уровнями, в том числе в частотно-селективном режиме генерации в зависимости от ширины и расположения «спектрального окна» резонатора.

б) Выявление роли молекул O_2 в колебательной кинетике молекул CO на высоких колебательных уровнях и обобщение теоретической модели для учета процессов VV' обмена между молекулами CO на высоких колебательных уровнях и молекулами O_2 на нижних уровнях.

Научная новизна работы

- В работе предложена и реализована концепция построения теоретической модели CO лазера, согласно которой для описания процессов колебательного энергообмена в активной среде, обеспечивающих возникновение и поддержание лазерной инверсии, используются результаты полуклассических вычислений констант скорости элементарных процессов одноквантового, многоквантового и асимметричного VV и VV' обмена в смеси газов $CO:N_2$.

- Построенная таким образом теоретическая модель хорошо описывает характеристики CO лазера на основной частоте и на обертоном в диапазоне верхних лазерных уровней $v=(5\div 38)$.

- Выявлена существенно лучшая применимость новой теоретической модели по сравнению с разработанными ранее моделями для описания характеристик частотно-селективных CO лазеров на переходах между высокими колебательными уровнями с $v>14$.

- Выполнено исследование процессов VV' обмена между молекулами CO и O_2 непосредственно в активной среде CO ЭИЛ, в результате которого найдены константы скорости близких к резонансу процессов VV' обмена между молекулами CO на высоких колебательных уровнях $v=(18\div 24)$ и молекулами O_2 на нижних уровнях. Наблюдаемое в экспериментах сильное влияние добавок O_2 с относительной концентрацией $0.05 < [O_2]/[CO] < 0.2$ на динамику КУСС в активной среде CO ЭИЛ на переходах с верхним уровнем $v>17$ и на КФР молекул CO в разряде постоянного тока на уровнях $v>20$ объясняется процессами квазирезонансного VV' обмена.

- Процессы асимметричного VV и VV' обмена двух квантов молекулы CO на высоких колебательных уровнях на один квант молекул CO или N_2 на нижних уровнях ограничивают ИК границу спектра излучения CO лазера на основной частоте или на обертоном переходами с верхним лазерным уровнем $v<41$.

- Теоретически показана возможность экспериментального исследования процессов энергообмена электронов в разряде и молекул CO на высоких колебательных уровнях методом лазерного зондирования активной среды CO ЭИЛ при использовании двух последовательных импульсов накачки.
- С использованием современного полуклассического приближения рассчитаны константы скорости большого числа процессов VV' и VV обмена с различным числом обмениваемых квантов между молекулами CO и N₂, а также между молекулами N₂.
- Найдены аналитические аппроксимации результатов полуклассических вычислений констант скорости одноквантовых процессов VV' обмена между молекулами CO и N₂, а также VV обмена между молекулами N₂, применимые в широком диапазоне температуры газа и колебательных уровней молекул.
- Установлено, что вопреки распространенному мнению о доминировании близкодействия при VV обмене между молекулами N₂ нельзя пренебрегать дальнодействием в потенциале взаимодействия этих молекул в расчетах констант скорости VV обмена при T < 2000 K.

Практическая значимость исследования

- Выполненная в работе верификация новой теоретической модели на основе сопоставления теории и эксперимента по характеристикам CO лазера в основной полосе и на обертоном в диапазоне верхних лазерных уровней $v=(5\div 38)$ подтверждает практическую значимость этой модели и обоснованность ее использования при разработках CO лазеров, работающих в диапазонах длин волн (2.5÷4.2) и (5.÷8.7) мкм, для различных технологических применений.
- С использованием этой модели определены характеристики CO лазеров, важные для их практического использования. Верхний предел КПД CO лазера на обертоном составляет 20%. При узкополосной генерации на переходах в пяти соседних колебательных полосах с колебательным числом самого верхнего лазерного уровня от $v=17$ до $v=36$ КПД лазера на обертоном или на основной частоте может достигать 50% от значений КПД в неселективном режиме.
- Увеличение плотности активной среды CO ЭИЛ с 0.2 Амага до 0.8 Амага при неизменном удельном энергокладе может приводить к большему чем на порядок величине росту максимальной мощности лазерного излучения в селективном режиме на переходах основной полосы или обертона с верхним лазерным уровнем $v>22$.
- Выполненное в работе обобщение теоретической модели CO лазера для учета влияния добавок молекул кислорода в активной среде с относительной концентрацией $0.05 < [O_2]/[CO] < 0.2$ позволяет учитывать сильное влияние квазирезонансных процессов VV' обмена между молекулами CO и O₂ на характеристики CO ЭИЛ на переходах с верхним лазерным уровнем $v>17$.
- Приведенные в диссертации подробные данные о константах скорости процессов колебательного энергообмена в смесях CO:N₂ для широких диапазонов колебательных квантовых чисел молекул представляют практический интерес для исследований в таких областях, как газовые лазеры, низкотемпературная плазма, физика атмосферы. Это касается и найденных в работе констант скорости квазирезонансного VV' обмена между CO и O₂.

- Компьютерные коды и методики исследований, разработанные при выполнении диссертационной работы, могут быть использованы при исследованиях кинетики различных физико-химических процессов в низкотемпературной плазме с участием колебательно-возбужденных двухатомных молекул и при решении задач молекулярной динамики.

Положения, выносимые на защиту

1. Матрицы констант скорости процессов колебательного энергообмена с различным числом обмениваемых квантов, сформированные на основе результатов полуклассических вычислений, позволяют наиболее корректно на сегодняшний день описывать процессы VV и VV' обмена в смеси газов $CO:N_2$ с участием молекул CO на высоких колебательных уровнях с $v > 14$.

2. Теоретическая модель CO лазера, основанная на результатах полуклассических вычислений констант скорости одноквантовых, многоквантовых и асимметричных процессов колебательного энергообмена в смеси газов $CO:N_2$, хорошо описывает характеристики CO лазера в основной полосе и на обертоне в спектральных диапазонах ($5.0 \div 8.7$) и ($2.5 \div 4.2$) мкм.

3. Процессы асимметричного VV и VV' обмена двух квантов молекулы CO на высоких колебательных уровнях на один квант молекул N_2 или CO на нижних уровнях ограничивают ИК границы спектров излучения CO лазера на основных и обертоновых переходах на уровне 8.9 мкм и 4.3 мкм, что соответствует переходам с верхним лазерным уровнем $v < 41$.

4. Сильное влияние добавок молекул O_2 с относительной концентрацией $0.05 < [O_2]/[CO] < 0.2$ на динамику КУСС на переходах с верхним уровнем $v > 17$ в активной среде CO ЭИЛ и на КФР молекул CO в разряде постоянного тока на уровнях $v > 20$ объясняется квазирезонансным VV' обменом между молекулами CO на высоких колебательных уровнях и молекулами O_2 на нижних уровнях.

Личный вклад автора

В диссертации систематизированы результаты работ автора, выполненных за период с 1988г. по 2019 г. и относящихся к физике процессов в активной среде электроразрядного CO лазера, к теоретическому моделированию лазерных характеристик в различных приближениях. Материалы диссертации основаны на идеях автора и получены им лично или при его определяющем участии. Экспериментальные исследования, результаты которых опубликованы в работах [7А-18А, 25А-26А, 28А-29А, 33А], вошедших в список основных публикаций автора по теме диссертации, проводили научные сотрудники лаборатории Газовых лазеров ФИАН: А.А. Ионин, Ю.М. Климачев, О.А. Рулев, А.Ю. Козлов, А.А. Котков, Л.В. Селезнев, Д.В. Сеницын, Ю.В. Терехов, С.В. Ветошкин. Автор проанализировал данные экспериментов путём сопоставления их с результатами расчётов, полученных автором при численном моделировании проведённых экспериментов с использованием теоретической модели CO лазера. Это же касается и результатов экспериментальных исследований, опубликованных в работах [6А, 30А], которые выполняли научные сотрудники ТРИНИТИ А.Д. Белых, В.А. Гурашвили, В.Н. Кузьмин, В.М. Путилин, Н.Г. Туркин и научный сотрудник СПбГУ Г.М. Григорян.

Апробация работы Материалы диссертации неоднократно докладывались и обсуждались на семинарах в ТРИНИТИ и ФИАН, на конференциях в нашей

стране и за рубежом. Основные результаты диссертации опубликованы в 34 журнальных статьях в научных изданиях, включенных в перечень ВАК и индексируемых в базе данных Web of Science, а также в 22 материалах международных конференций. Списки этих публикаций приведены в конце автореферата.

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка сокращений и обозначений, используемых в диссертации, списка журнальных статей и докладов на конференциях, выполненных с участием автора по теме диссертации, списка цитируемой литературы и приложений. Она содержит 93 рисунка и 29 таблиц. Объем диссертации 265 страниц. Список журнальных статей и докладов на конференциях по теме диссертации занимает 9 страниц, список цитируемой литературы 27 страниц, приложения I и II 19 страниц.

Основное содержание работы

Во введении дана общая характеристика работы, обоснована актуальность работы, описано состояние исследований по теме диссертации, указаны цели работы, перечислены научная новизна, практическая ценность работы, основные положения, выносимые на защиту.

В первой Главе кратко описан метод вычислений КС процессов VV обмена и VT релаксации между двухатомными молекулами; приведены результаты расчетов КС колебательного энергообмена между молекулами CO и N₂, а также между молекулами N₂, которые сравниваются с данными экспериментов и результатами расчетов других авторов. Приведены аналитические выражения, хорошо аппроксимирующие результаты вычислений КС VV обмена.

Новые вычисления КС потребовались, в первую очередь, для получения достоверной информации о процессах VV обмена в АС СО лазера. В этих расчетах использовался полуклассический метод, в котором колебательное движение сталкивающихся молекул рассматривается квантово-механически, а поступательное и вращательное движение – классически. Ранее, в работах Г. Биллинга и М. Качиаторе КС процессов колебательного энергообмена при столкновениях СО-СО, N₂-СО, N₂-N₂ уже рассчитывались с использованием полуклассического метода [1-4], который, однако, был существенно упрощен. А именно: в расчетах использовались волновые функции гармонического осциллятора, а собственные значения энергии колебаний соответствовали осциллятору Морзе. Такое приближение, позволяющее многократно уменьшить объем вычислений, известно в литературе как “Energy Corrected Harmonic Oscillator” и далее обозначается как ЕСНО. Дальнейшее усовершенствование метода было сделано Г. Биллингом [5] за счет отказа от этого приближения и более детального, чем в предыдущих работах, учета взаимосвязи квантовой и классической подсистем. Для столкновений СО-СО в этой работе сравнивались результаты расчётов по усовершенствованной методике и с использованием ЕСНО приближения. При использовании усовершенствованного метода наиболее сильно изменились значения КС процессов многоквантового VV обмена: они стали заметно меньше. Наибольшие отличия (до 4 раз и более) были выявлены для процессов с большей отстройкой от резонанса. Класс

точности расчетных КС определяется надежностью данных о потенциалах межмолекулярного взаимодействия. За последние 20÷30 лет появились новые более надежные данные о потенциалах взаимодействия между двухатомными молекулами. Они основаны на результатах квантово-химических вычислений и на результатах измерений второго вириального коэффициента, сечений рассеяния молекул в молекулярных пучках и т.д. Эти данные, наряду с усовершенствованным полуклассическим методом, были востребованы при проведении новой серии вычислений КС VV обмена в смеси газов CO:N₂.

Для моделирование характеристик СО лазера требуется учёт большого числа процессов VV обмена (более чем 10² процессов для каждой пары молекул). Прогресс компьютерной техники за последние десятилетия сделал возможными вычисления КС для такого числа процессов. Расчеты КС VV обмена между молекулами СО по усовершенствованной методике были выполнены в работах [6, 21А]. В дополнение к этим КС в работах [20А, 23А, 24А, 27А] были рассчитаны КС для пар молекул N₂-СО и N₂-N₂.

В разделе 1.1 кратко описана методика вычислений сечений и КС процессов VV обмена и VT релаксации при столкновениях двухатомных молекул. Потенциал взаимодействия молекул зависит от координат всех атомов молекул и может быть выражен в виде $V_{\text{int}} = V_{\text{int}}(R, r_i, \phi_i, \gamma_i)$, $i=1, 2$; R – расстояние между центрами масс молекул, r_i – расстояния между атомами в каждой молекуле, γ_i – полярный угол между вектором, соединяющим центры масс молекул, и векторам, задающим взаимное расположение атомов в молекуле i ; ϕ_i – азимутальный угол молекулы i , так что разность $(\phi_1 - \phi_2)$ определяет угол между плоскостями вращения сталкивающихся молекул. Волновая функция системы двух сталкивающихся молекул ищется в виде разложения по произведениям волновых функций двух осцилляторов Морзе:

$$\Psi(r_1, r_2, t) = \sum_{v_1, v_2} \Phi_{v_1}(r_1) \Phi_{v_2}(r_2) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(E_{v_1} + E_{v_2}) \cdot t\right] a_{v_1 v_2}(t), \quad (1)$$

где $a_{v_1 v_2}(t)$ – квантовые амплитуды, E_{v_i} – собственные значения осциллятора Морзе. После подстановки (1) в нестационарное уравнение Шредингера с Гамильтонианом, учитывающим зависящее от времени межмолекулярное взаимодействие и возмущающее влияние вращательного движения осцилляторов, квантовая часть задачи сводится к решению системы связанных уравнений для амплитуд $a_{v_1 v_2}(t)$. Они решаются совместно с уравнениями Гамильтона для классического движения сталкивающихся молекул. В этом случае в качестве потенциала взаимодействия используется эффективный потенциал $V_{\text{eff}}(R(t))$, представляющий собой ожидаемое значение потенциала взаимодействия в каждой точке классической траектории с $R=R(t)$:

$$V_{\text{eff}}(R(t)) = \left\langle \Psi(r_1, r_2, t) \left| \hat{V}_{\text{int}} \right| \Psi(r_1, r_2, t) \right\rangle \quad (2)$$

Перед усреднением по переменным r_1, r_2 потенциал V_{int} разлагается в ряд Тейлора до членов $\sim \Delta r_i^2$ включительно, где $\Delta r_i = (r_i - \bar{r}_i)$, \bar{r}_1 и \bar{r}_2 – равновесные расстояния между атомами в молекуле 1 и 2, что позволяет учесть влияние колебаний молекул на классически рассматриваемое движение. После

столкновения квантовая амплитуда перехода в состояние с квантовыми числами v_1', v_2' для данной классической траектории равна $a_{v_1'v_2'} = \lim_{t \rightarrow \infty} a_{v_1'v_2'}(t)$ и вероятность перехода $P(v_1, v_2 \rightarrow v_1', v_2') = |a_{v_1'v_2'}|^2$. Начальные условия при расчете каждой траектории с фиксированной классической энергией U (U – сумма энергий поступательного и вращательного движения) выбирались по методу Монте-Карло. Сечения переходов $\sigma_{(v_1, v_2 \rightarrow v_1', v_2')}(U)$ вычислялись путём усреднения вероятностей переходов по всем рассчитанным траекториям. Рассчитывались $\sim 10^3$ траекторий для каждой энергии U при точности вычислений $\varepsilon \approx 10\%$. Обычно сечения рассчитывались для 15÷20 значений U от 75 до 50000 см^{-1} . КС элементарных процессов вычислялись путем усреднения сечений процессов по энергии с использованием равновесной функции распределения.

Несмотря на продолжительную историю квантово-химических расчетов полной ясности в определении поверхности потенциальной энергии в широком диапазоне расстояний между центрами масс молекул нет даже для таких сравнительно простых пар взаимодействующих молекул, как CO-CO, CO-N₂ и N₂-N₂. Для проведения траекторных расчетов желательно иметь аналитические выражения для энергии взаимодействия, учитывающие взаимную ориентацию молекул при столкновении. В разделах 1.2, 1.3 описан выбор потенциалов взаимодействия, приведены результаты расчетов КС VV' обмена между молекулами N₂ и CO и результаты расчетов КС VV обмена и VT релаксации в молекулярном азоте. Предполагалось, что межмолекулярный потенциал можно представить в виде суммы «близодействующего» отталкивания (близодействия) и «дальнодействующего» взаимодействия (дальнодействия):

$$V_{\text{int}}(R, r_i, \gamma_i, \phi_i) = V_{S-R} + V_{L-R} \quad (3)$$

Для пар изоэлектронных молекул N₂-CO и N₂-N₂ близодействие выражалось в виде суммы парных взаимодействий атом-атом:

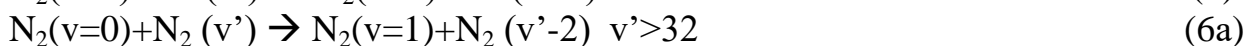
$$V_{S-R} = \sum_{i=1}^4 A \exp[-R_i(\alpha_0 + \alpha_1 R_i)] \quad (4)$$

Коэффициенты в (4) были определены в [7] при анализе результатов *ab initio* вычислений и экспериментальных данных; R_i – расстояния между атомами первой и второй молекул. V_{L-R} задавался в виде суммы диполь-квадрупольного (для N₂-CO), квадруполь-квадрупольного и дисперсионного взаимодействий:

$$V_{L-R} = V_{D-Q} + V_{Q-Q} + V_{DISP} \quad (5)$$

Приводятся выражения для этих слагаемых. Расчетные КС VV обмена сравниваются в разделах 1.2, 1.3 с данными экспериментальных и теоретических работ. Так на Рис. 1 результаты расчетов КС процесса N₂($v=0$)+CO($v'=1$) \rightarrow N₂($v=1$)+CO($v'=0$) [20А] при T=(80÷300) К сравниваются с результатами экспериментов [8]. На этом же рисунке приведены результаты расчетов [3], выполненных в ЕСНО приближении. КС VV' и VV обмена для пар молекул CO-N₂ и N₂-N₂ были рассчитаны для большого числа процессов, причем для ряда процессов КС рассчитаны впервые. В частности, были рассчитаны КС для близких к резонансу асимметричных процессов, в которых

число колебательных квантов передаваемых одной молекулой не совпадает с числом квантов, получаемых другой молекулой [20А, 27А]:



На Рис. 2 приведены расчетные КС процессов (6). Вблизи резонанса эти КС достигают довольно высоких значений. Для пар CO-N₂ и N₂-N₂ также рассчитывались КС процессов двухквантового VV обмена. Результаты этих вычислений представлены в виде графиков и таблиц. Даже для состояний с высокими колебательными квантовыми числами КС двухквантового VV обмена меньше КС одноквантового обмена на порядок величины и более.

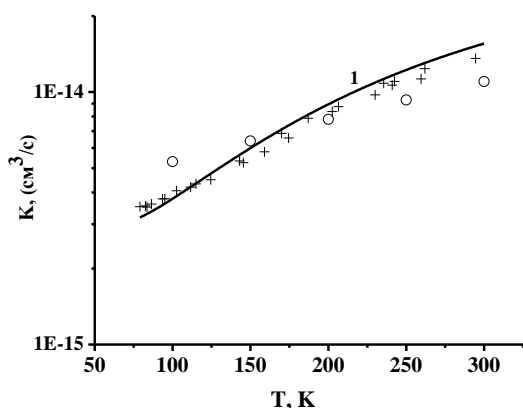


Рис. 1. КС процесса $\text{N}_2(1)+\text{CO}(0)\rightarrow\text{N}_2(0)+\text{CO}(1)$; 1 –теория; (+) – эксперимент [8]; (o) –расчет [3].

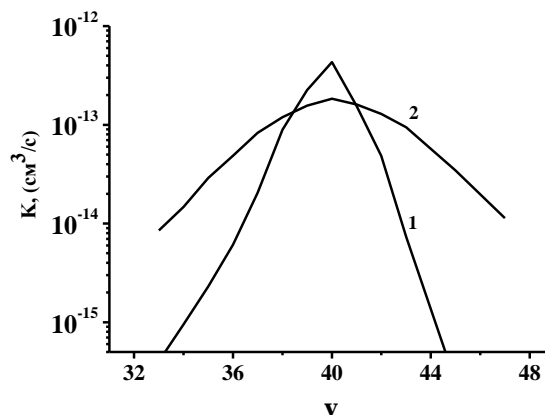


Рис.2. КС процессов (6). Зависимости 1, 2 соответствуют температуре газа 100 и 500 К.

Верификация рассчитанных КС VV обмена между молекулами N₂ путем их сравнения с экспериментом представляет серьезную проблему. Дело в том, что для получения данных о КС обычно используют результаты измерений КФР. Из таких измерений невозможно однозначно извлечь информацию о КС отдельного процесса, т.к. форма КФР определяется большим числом процессов VV обмена. Если для молекул с постоянным дипольным моментом измерения КФР основываются на измерениях спонтанного излучения, то для молекул N₂ измерения колебательных населенностей возможны, в основном, методом КАРС, либо комбинационного рассеяния. В разделе 1.3 сопоставляется динамика КФР молекул N₂, измеренная в [9] для колебательных уровней $v=(0\div 16)$ с использованием комбинационного рассеяния, с результатами численных расчетов. В расчетах использовались КС, рассчитанные в полуклассическом приближении примерно для 300 одноквантовых процессов VV обмена, что позволило заполнить матрицу КС путем интерполяции. Использование нового набора КС обеспечило хорошее согласие теории с экспериментом по КФР на разных стадиях VV обмена.

В разделе 1.3 анализируется роль дальнего действия в процессах VV обмена между молекулами N₂. Приведены результаты вычислений КС VV обмена с использованием двух упрощенных потенциалов взаимодействия [31А]. Первый потенциал состоял лишь из ближнего действия V_{S-R} . Второй включал и V_{S-R} и V_{DISP} . КС процессов $\text{N}_2(v)+\text{N}_2(u=1)\rightarrow\text{N}_2(v+1)+\text{N}_2(u=0)$, рассчитанные с

упрощенными потенциалами и с полным потенциалом межмолекулярного взаимодействия, сравниваются на Рис. 3. Легко видеть, что при $T=300$ К дисперсионное и мультипольное взаимодействия доминируют в процессах VV обмена между молекулами N_2 .

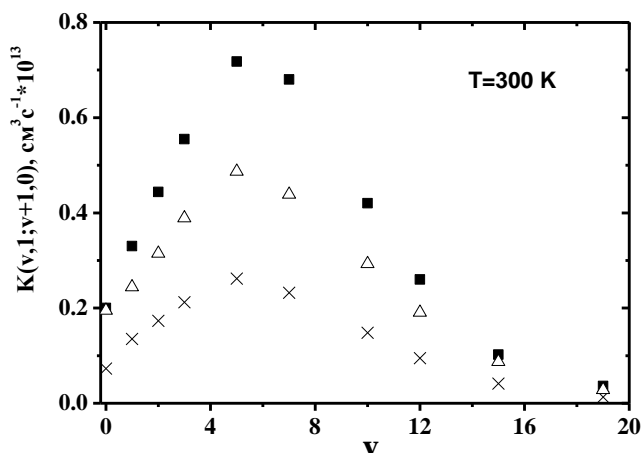


Рис. 3. Расчетные КС процессов $N_2(v)+N_2(u=1) \rightarrow N_2(v+1)+N_2(u=0)$ для различных межмолекулярных потенциалов. (■) - использован потенциал (3); (×) - учтено только ближкодействие (4); Δ - учтено ближкодействие и взаимодействие Ван-дер-Ваальса. $T=300$ К.

Из результатов этих расчетов также следует, что при $T > 2000$ К основную роль в данных процессах играет «ближкодействие». При использовании потенциала, учитывающего лишь «ближкодействие» (см. например, [10]), расчетные КС при более низких температурах газа оказываются заметно заниженными.

В этом же разделе результаты расчетов КС процессов VT релаксации в азоте сопоставляются с результатами теоретической работы [4] и с экспериментом. Выявлено согласие теории и эксперимента для $N_2(v=1)$ с данными экспериментов при высоких температурах ($T > 1500$ К). При $T=(300 \div 500)$ К расчетные КС VT релаксации для $N_2(v=1)$ заметно ниже экспериментально-измеренных, но хорошо согласуются с результатами [4].

Исследователям часто удобнее работать с компактными выражениями для КС, а не с громоздкими таблицами их значений, которые порой необходимо интерполировать. В разделе 1.4 приведены найденные в работе аналитические аппроксимации, хорошо описывающие результаты вычислений КС VV обмена для пар молекул N_2-N_2 и $CO-N_2$ в широких диапазонах колебательных чисел и газовых температур. Для аппроксимации расчетных КС использовались формулы модифицированной теории Шварца, Славского, Герцфельда (ШСГ) (см., например, в [11]), позволяющие качественно верно (в ряде случаев и количественно верно) описывать вклад различных компонентов потенциала взаимодействия. Основные особенности используемых в разделе 1.4 (см. [31A]) аналитических выражений иллюстрирует формула для аппроксимации КС квазирезонансного VV' обмена в процессах $CO(v)+N_2(u) \rightarrow CO(v-1)+N_2(u+1)$:

$$K_{v,v-1}^{u,u+1} = \mathbb{Z} \frac{v}{(1-v \cdot \delta_{CO})} \cdot \frac{(u+1)}{(1-(u+1) \cdot \delta_{N_2})} \exp\left(\frac{\Delta E}{2kT}\right) \left\{ a \cdot T \cdot f(y) \cdot F + \frac{b}{T} \exp\left(-\frac{\Delta E^2}{CkT}\right) \right\} \quad (7)$$

Первое слагаемое в (7) соответствует «ближкодействию» и Ван-дер-Ваальсову притяжению, второе – диполь-квадрупольному взаимодействию; $\delta = x_e \omega_e / \omega_e$, $x_e \omega_e$ – постоянная ангармонизма, ω_e – энергия колебательного кванта; ΔE – энергетический эффект процесса; \mathbb{Z} – константа скорости газокинетических столкновений, $f(y)$ – функция адиабатичности [11], $y = l_{ST} \cdot |\Delta E| \cdot \pi^2 \cdot \sqrt{\frac{2 \cdot \mu \cdot k}{h^2 \cdot T}}$, l_{ST} –

параметр, характеризующий масштаб близкодействующего отталкивания, μ – приведенная масса; k , h – фундаментальные постоянные; F – множитель, введенный для учета притяжения Ван-дер-Ваальса; коэффициенты a , b , C и l_{ST} – полуэмпирические подгоночные параметры. Эта формула является одним из вариантов аппроксимаций, предложенных в разделе 1.4 для КС VV' обмена между CO и N₂. Аппроксимация КС VV обмена между молекулами N₂ имеет такую же структуру, только вместо диполь-квадрупольного в ней учитывается квадруполь-квадрупольное взаимодействие. Для возможности использования таких аппроксимаций в широком температурном диапазоне параметры a и b были определены для шести значений T в интервале (200÷3000) К. Параметры C и l_{ST} , величина которых определяется потенциалом взаимодействия, от температуры не зависели. Значения полуэмпирических параметров при каждой фиксированной газовой температуре находились путём численной минимизации функции ошибок $S = \frac{1}{K} \sum_{i=1}^N \left| \frac{k_i^{an} - k_i^{SC}}{k_i^{SC}} \right|$, где K – число процессов, для которых ищется аналитическая аппроксимация КС, рассчитанных в полуклассическом приближении; k_i^{SC} – результаты полуклассических вычислений; k_i^{an} – результаты использования аналитической аппроксимации. Вычисления прекращались по достижению относительной ошибки аппроксимации, не превышающей 15÷20% для рассматриваемых процессов. Рис. 4 иллюстрирует, как результаты вычислений КС VV' обмена между CO и N₂ при $T=200$ и 2000 К описываются формулой (7).

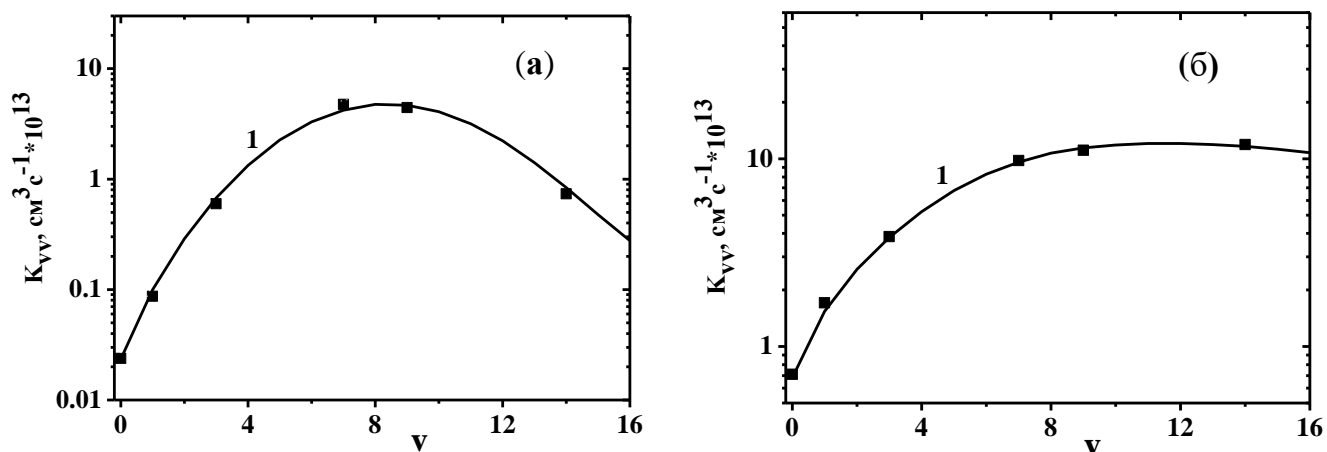


Рис. 4. КС процессов $N_2(v)+CO(1) \rightarrow N_2(v+1)+CO(0)$; (а) $T=200$ К, (б) $T=2000$ К, 1 – аппроксимация (7), (■) – результаты полуклассических вычислений [31А].

На Рис. 5 расчетные КС процессов $N_2(v)+N_2(u=1) \rightarrow N_2(v+1)+N_2(u=0)$, сравниваются с аппроксимацией из [31А] и с аппроксимациями из других работ, часто используемыми исследователями. Там же приведены КС, рассчитанные в работе [10] в полуклассическом приближении при учете лишь близкодействующей части потенциала межмолекулярного взаимодействия, из работы [4]. Расчетные КС для процессов $N_2(v)+N_2(u) \rightarrow N_2(v+1)+N_2(u-1)$ с квантовыми числами v и u в интервалах (1÷10) и (1÷30) сравниваются с

найденной аппроксимацией на Рис. 6. Все параметры аппроксимаций КС, найденных для пар молекул N_2 -CO и N_2 - N_2 , приведены в таблицах раздела 1.4.

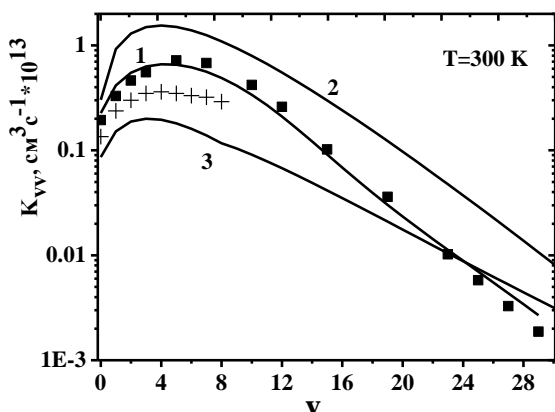


Рис. 5. КС процессов $N_2(v)+N_2(1) \rightarrow N_2(v+1)+N_2(0)$, (■) – КС, рассчитанные полуклассически; 1 – аппроксимация работы [31A]; 2 – аппроксимация работы [11]; 3 – аппроксимация [12]; (+) – данные работы [10].

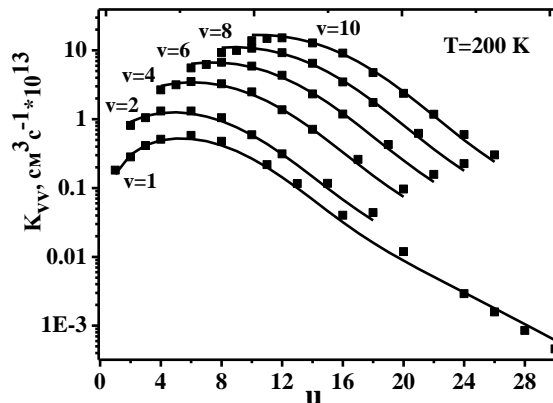


Рис. 6. КС для процессов $N_2(v)+N_2(u) \rightarrow N_2(v-1)+N_2(u+1)$. Сплошные линии – результат аппроксимации, предложенной в работе [31A]; (■) – КС, рассчитанные полуклассически.

Результаты Главы 1, опубликованы в работах [20A-21A, 23A-24A, 27A, 31A, 15Б, 19Б, 21Б].

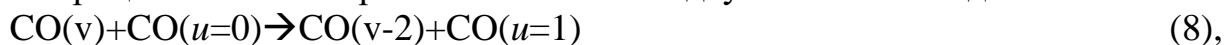
Во второй Главе описана теоретическая модель СО лазера, учитывающая совокупность одноквантовых и многоквантовых процессов VV обмена в смеси газов $CO:N_2$, основанная на использовании расчетных КС. Описана верификация модели на основе сопоставления теории и эксперимента по динамике восстановления инверсии населенностей на лазерном переходе в АС СО ЭИЛ после ее возмущения частотно-селективным излучением. Описаны уравнения АС СО лазера, использованные в расчетах.

Долгое время при расчетах колебательной кинетики в АС СО лазера использовались теоретические модели, учитывающие лишь процессы *одноквантового колебательного обмена* (ОКО). Это сокращение используется далее для обозначения таких моделей. Модели ОКО удовлетворительно описывали характеристики СО лазеров с криогенным охлаждением АС, работающих, как правило, на переходах $v \rightarrow v-1$ между нижними колебательными уровнями молекул СО с $v < 12$. В этих моделях КС VV обмена между молекулами СО в широком диапазоне уровней рассчитывались путем экстраполяции КС, измеренных для нижних уровней, с помощью выражений, основанных на теории возмущений в первом порядке. При этом вероятности квазирезонансных процессов VV обмена при низких температурах близки к единице уже для колебательного уровня $v \approx 10$ и продолжают расти далее с номером v , достигая значений значительно больше единицы. Столь высокие вероятности указывают на неприменимость указанного приближения. В то же время экспериментальные данные о процессах VV обмена с участием молекул СО на высоких колебательных уровнях практически отсутствуют. Все это затрудняет описание колебательной кинетики молекул СО и теоретическое

исследование характеристик СО лазера, генерирующего излучение в спектральных диапазонах (2.7÷4.2), (5.4÷8.7) мкм, соответствующих переходам первого колебательного обертона и фундаментальной полосы между уровнями $v > 12$. Корректный учет процессов VV обмена между молекулами СО также необходим и для анализа механизмов диссипации энергии в колебательно-возбужденном газе, в задачах плазмохимии и т. д.

Необходимо отметить работу [13], в которой методом двойного резонанса измерялись возмущения КУСС на выбранном переходе, возникающие в результате взаимодействия со средой короткого импульса излучения на этом же переходе или на переходе в соседних колебательных полосах. Анализ этих возмущений позволил выявить заметную роль двухквантового VV обмена между молекулами СО на уровнях $v > 14$. Позже, в теоретических работах [1, 2], было показано, что с ростом v необходимо учитывать не только двухквантовые процессы, но и трехквантовые и четырехквантовые.

Впервые, теоретическая модель активной среды СО лазера, учитывающая совокупность процессов VV обмена с числом обмениваемых квантов $\Delta v = (1 \div 4)$, была разработана в работах [4А, 5А]. Это стало возможным благодаря появлению работ [1, 2], содержащих результаты полуклассических вычислений КС процессов VV обмена между молекулами СО с разным числом обмениваемых квантов. Ввиду малого числа процессов, для которых в указанных работах были рассчитаны КС, заполнение полной матрицы констант скорости, необходимой для проведения кинетических расчетов, представляло серьезную проблему. Далее для обозначения моделей активной среды, учитывающих процессы многоквантового VV обмена, используется аббревиатура МКО. По мере появления новых расчетных данных о константах скорости эта модель обновлялась. Наиболее полная модель МКО для газовых смесей, не содержащих молекулы N_2 , была сформулирована в [21А]. Она основывается на результатах расчетов усовершенствованным полуклассическим методом КС большого числа процессов VV обмена между молекулами СО в широком диапазоне уровней $v = (0 \div 40)$ с различным числом обмениваемых квантов [6, 21А]. В ней используются и рассчитанные в работе [6] КС процессов асимметричного VV обмена двух квантов на один:



которые могут заметно влиять на КФР молекул СО в области высоких уровней. Результаты работ [6, 21А] позволили выявить, в каких случаях существенна роль 2-х, 3-х и 4-х квантового VV обмена и как замедляется рост КС близких к резонансу процессов одноквантового VV обмена по мере увеличения колебательных квантовых чисел молекул. Это иллюстрирует Рис. 7, на котором сопоставляются расчетные КС для ближайших к резонансу процессов VV обмена между молекулами СО с разным числом обмениваемых квантов и КС одноквантовых процессов, используемые в модели ОКО. При наличии в АС СО лазера молекул N_2 важную роль могут играть процессы асимметричного VV' обмена (6) между молекулами СО на высоких колебательных уровнях, и молекулами N_2 на нижних уровнях. Эти процессы учитываются в модели МКО для смесей СО: N_2 , разработанной в работе [23А]. Возможную конкуренцию процессов асимметричного VV и VV' обмена (6) и (8) иллюстрирует Рис.8.

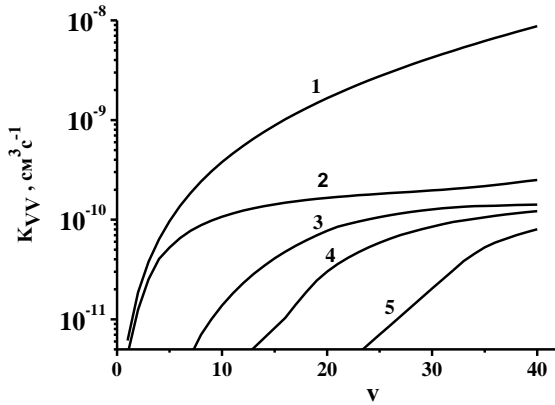


Рис. 7. КС процессов $\text{CO}(v)+\text{CO}(v+1-\Delta v)\rightarrow\text{CO}(v-\Delta v)+\text{CO}(v+1)$. 2, 3, 4, 5 – соответствуют $\Delta v=1, 2, 3, 4$ [21А, 6]. 1 – КС процессов с $\Delta v=1$ в модели ОКО [14]; $T=100$ К.

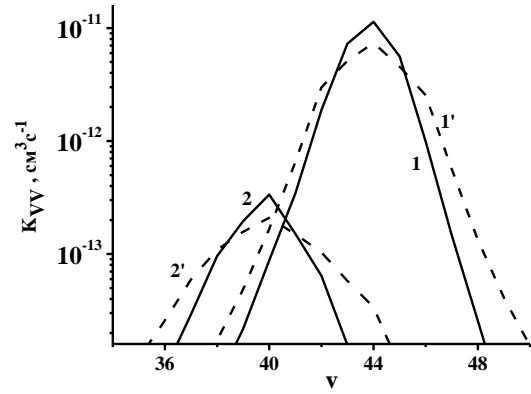


Рис. 8. Зависимости КС процессов $\text{CO}(v)+\text{CO}(0)\rightarrow\text{CO}(v-2)+\text{CO}(1)$ (1, 1') и $\text{CO}(v)+\text{N}_2(0)\rightarrow\text{CO}(v-2)+\text{N}_2(1)$ (2, 2') от номера уровня v [23А]. Сплошная линия - $T=150$ К; пунктирная - $T=300$ К.

Переход к модели МКО сказался на результатах расчетов динамики КФР и характеристик СО лазера. В частности, при использовании модели МКО установление квазистационарной КФР происходит медленнее, чем предсказывает модель ОКО. Также наблюдается существенное уменьшение населенностей $\text{CO}(v)$ для $v>38$, что является результатом влияния асимметричного обмена. Однако, квазистационарные КФР молекул СО в области «плато», рассчитанные с использованием обеих моделей: МКО и ОКО, оказались довольно близкими. Это объясняется примерным равенством скорости VV обмена в модели ОКО и суммарной скорости процессов, взятых с соответствующими весами в модели МКО.

Как уже отмечалось в работе [13] при использовании модели ОКО не удастся описать динамику восстановления КУСС на переходе между высокими колебательными уровнями с $v>14$ после взаимодействия со средой короткого импульса излучения на соседнем или на рассматриваемом переходе. Динамику восстановления квазистационарной КФР в процессах VV обмена после ее быстрого и малого возмущения на уровне v при отсутствии накачки в разряде и генерации излучения можно приближенно описать простейшим уравнением $dn_v/dt = -\Delta n_v/\tau_{VV}$, где Δn_v – возмущение населенности, τ_{VV} – время релаксации данного возмущения, $1/\tau_{VV}$ – частота VV обмена. В модели МКО частота VV

обмена в этом уравнении $\frac{1}{\tau_{VV}} = \sum_{m \geq 1} \left(\sum_{i \geq 0} n_i \cdot Q_{v,v-m}^{i,i+m} + \sum_{i \geq m} n_i \cdot Q_{v,v+m}^{i,i-m} \right)$, где n_i – колебательные населенности на уровнях i , а $Q_{v,v-m}^{i,i+m}$, $Q_{v,v+m}^{i,i-m}$ – КС процессов с различным числом обмениваемых квантов m , опустошающих уровень v . В модели ОКО $m=1$ и частота VV обмена определяется аналогично. Сравнение частот VV обмена, рассчитанных в моделях ОКО и МКО при условии квазистационарности КФР, выявило их заметные отличия. Это иллюстрирует Рис. 9, на котором приведены расчетные зависимости $1/\tau_{VV}$ от номера уровня v . Легко видеть, что в модели ОКО частота VV обмена для $v>10$ существенно выше, чем в модели МКО, а для $v>15$ указанное отличие может быть 2^x - и 3^x -кратным.

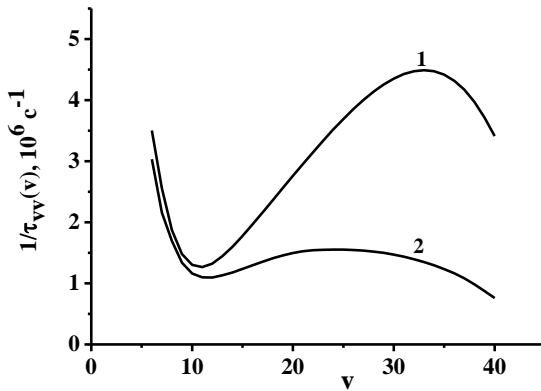


Рис. 9. Зависимости частоты VV обмена от квантового числа v . 1 – модель ОКО, 2 – модель МКО. СО:Не=1:4, начальная температура 100 К, плотность 0.2 Амага, $E/N=10^{-16}$ В·см², длительность импульса накачки (разряда) 30 мкс, энерговклад 200 Дж/(л·Амага). Расчеты сделаны на момент времени через 300 мкс после включения накачки [21А].

Данные отличия указывают на актуальность проведения экспериментов по измерениям τ_{VV} после возмущения КФР молекул СО на двух соседних уровнях коротким импульсом селективного излучения на переходе в полосе $v \rightarrow v-1$.

В разделе 2.3 представлено сопоставление теории и эксперимента по динамике восстановления инверсии в АС СО лазера на переходе в полосе $v \rightarrow v-1$ после генерации короткого импульса частотно-селективного излучения в режиме модуляции добротности резонатора (МДР) [10А, 14А]. С задержкой τ_{1-2} после первого импульса излучения генерировался второй импульс. Первое включение резонатора производилось лишь при достаточно больших задержках τ_d после включения импульса накачки длительностью ≈ 30 мкс, чтобы к моменту развития импульса излучения успела сформироваться квазистационарная КФР. Восстановление инверсии на лазерных уровнях происходит при этом только за счет VV обмена. Рост энергии второго импульса с увеличением τ_{1-2} позволяет судить о восстановлении инверсии населенностей. Типичные импульсы излучения селективного ЭИ СО лазера с двойной МДР представлены на Рис.10.

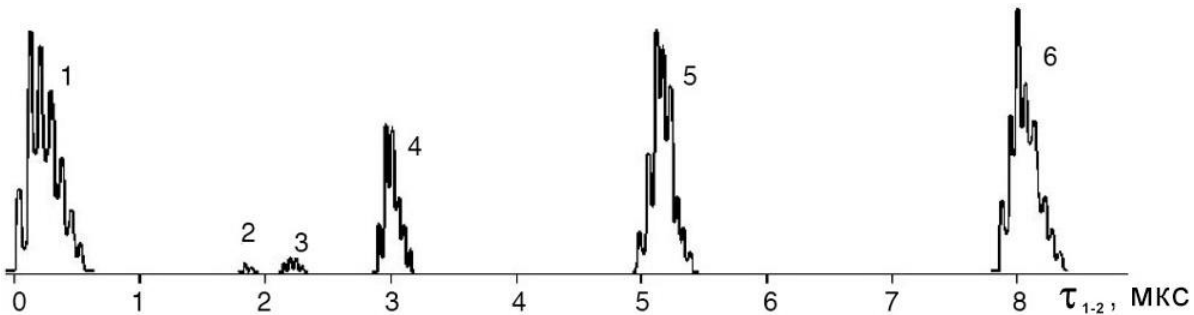


Рис. 10. Форма импульсов излучения селективного ЭИ СО лазера с МДР [14А]. 1 – первый импульс излучения; 2, 3, 4, 5, 6 - повторные импульсы, полученные в нескольких экспериментах; переход 16→15 Р(16), энерговклад 250 Дж/(л·Амага)

Легко видеть, что с ростом τ_{1-2} форма второго импульса приближается к форме первого импульса. Для характеристики степени восстановления колебательных населенностей лазерных уровней после первого импульса было взято отношение Q_2/Q_1 , где Q_2 и Q_1 энергии 2^{го} и 1^{го} импульсов. Измеренные зависимости Q_2/Q_1 от времени задержки τ_{1-2} сравнивались с результатами расчетов, выполненных с моделями ОКО и МКО. Сопоставление теории с экспериментом показало, что модель ОКО удовлетворительно описывает результаты экспериментов лишь для переходов между сравнительно низкими

колебательными уровнями ($v < 10$). Результаты расчетов $Q_2/Q_1(\tau_{1,2})$ для таких переходов в модели МКО близки к результатам расчета в модели ОКО, и к результатам измерений [10А]. На примере динамики восстановления второго импульса на переходе $v=7 \rightarrow 6$ P(16) это иллюстрирует Рис. 11а. Аналогичное сопоставление теории и эксперимента для переходов $v=13 \rightarrow 12$ P(11), $v=15 \rightarrow 14$ P(13), $v=19 \rightarrow 18$ P(15), $v=20 \rightarrow 19$ P(15) [14А] позволило сделать вывод, что с ростом v увеличиваются отличия зависимостей $Q_2/Q_1(\tau_{1,2})$, рассчитанных в модели ОКО и измеренных в экспериментах. Использование в расчетах модели МКО позволяет достичь согласия теории и эксперимента, что иллюстрирует Рис. 11б на примере перехода $19 \rightarrow 18$ P(15).

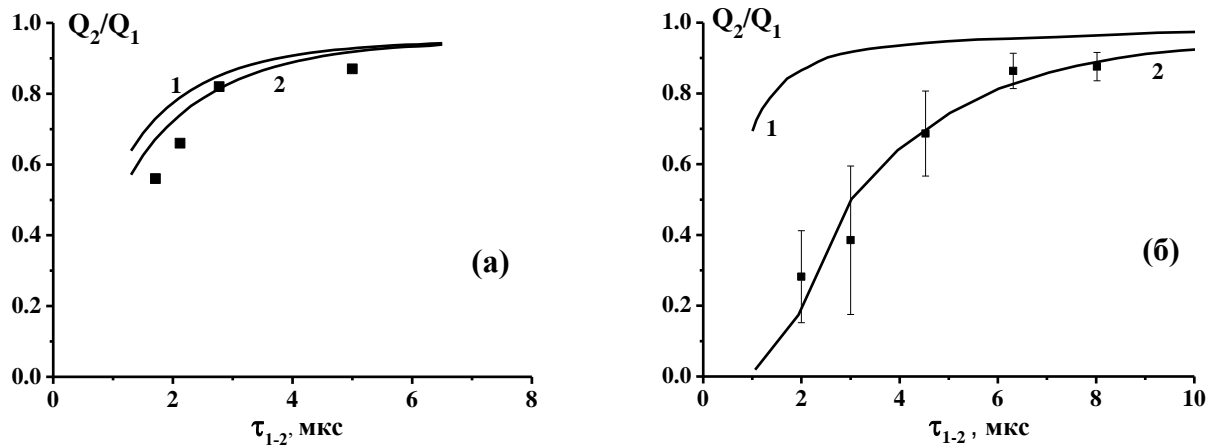


Рис. 11. Зависимости отношения энергии второго импульса к энергии первого импульса от задержки $\tau_{1,2}$; (а) переход $7 \rightarrow 6$ P(16), СО:N₂=1:6, 285 Дж/(л·Амага), $\tau_d=590$ мкс. (б) переход $19 \rightarrow 18$ P(15), СО:N₂=1:1, 330 Дж/(л·Амага). $\tau_d=590$ мкс. 1 – расчет с моделью ОКО, 2 – с моделью МКО, (■) – эксперимент [10А, 14А].

При $v \geq 14$ модель ОКО фактически непригодна для описания динамики колебательных населенностей на уровнях v и $v-1$ после их кратковременного возмущения, что согласуется с выводом работы [13].

В разделе 2.4 описаны уравнения, использовавшиеся при моделировании характеристик СО лазера, выбор коэффициентов в этих уравнениях и методы их решения. Приведены уравнения, использованные в расчетах интенсивности лазерного излучения, плотности и температуры АС импульсных СО ЭИЛ в предположении их пространственной однородности. Представлены формулы для вычисления коэффициентов усиления/поглощения излучения на колебательно-вращательных переходах молекулы СО. Характеристики быстропротекающих СО лазеров с продольной прокачкой АС рассчитывались с использованием одномерных стационарных уравнений газовой динамики. Систему уравнений для населённости колебательных уровней при неизменной плотности газа схематически можно представить в виде:

$$\frac{dn_v}{dt} = R_{e-v}^v + R_{V-v}^v + R_{V-T}^v + R_{SP}^v + R_{IND}^v, \quad (9)$$

где R_{e-v}^v , R_{V-v}^v , R_{V-T}^v , R_{SP}^v , R_{IND}^v – скорости изменения населенности уровня v электронным ударом, в процессах VV обмена, VT релаксации, при спонтанном и индуцированном излучении. Отдельные члены этих уравнений подробно

описываются в разделе 2.4. Система уравнений (9) решалась самосогласованно со стационарным уравнением Больцмана для сферически симметричной функции распределения электронов по энергии (ФРЭЭ): $\frac{dJ_F(u)}{du} + \frac{dJ_{el}}{du} = St(f_0)$, где u – энергия электронов; J_F и J_{el} потоки электронов в энергетическом пространстве, обусловленные, соответственно, наличием электрического поля и потерями энергии при упругих электрон-молекулярных столкновениях и при возбуждении молекулярных вращений; $St(f_0)$ – интеграл столкновений, учитывающий возбуждение/девозбуждение колебательно- и электронно-возбужденных состояний молекул и атомов, диссоциацию и ионизацию при столкновениях с электронами. Были учтены и процессы колебательного возбуждения/девозбуждения молекул СО на уровнях $v \geq 10$, индуцированные потенциальным взаимодействием электронов с молекулами. При расчете характеристик АС СО лазера баланс энергии электронов выполнялся с точностью не хуже 1%. Уравнение Больцмана пересчитывалось с шагом по времени, определяемым по скорости изменения контролируемых параметров (E/N , колебательная температура первого колебательного уровня).

В разделе 2.4 также описаны упрощения, использованные в теоретической модели СО лазера, и оценены вносимые ими погрешности вычислений. В качестве примера была рассмотрена одномерная модель быстропроточного СО лазера, в которой плотности потока фотонов $\Pi_{v,j}$ излучения на колебательно-вращательных переходах рассчитывались с использованием простейших уравнений баланса:

$$u(x) \frac{d\Pi_{v,j}}{dx} = c \cdot (g_{v,j}(x) - G_{th}(x)) \cdot \Pi_{v,j}(x) + \frac{c \cdot \Omega}{4\pi} n_v(x) A_1^v, \quad (10)$$

Здесь $\Pi_{v,j}$, $G_{v,j}$, $\Gamma_{v,j}$ – плотность потока фотонов, коэффициент усиления и пороговое значение коэффициента усиления на колебательно-вращательном переходе $(v, j-1) \rightarrow (v-1, j)$. Интенсивность излучения $I_{v,j} = \Pi_{v,j} \cdot \hbar\omega$, где $\hbar\omega$ – энергия кванта излучения на рассматриваемом переходе. Поток АС направлен вдоль оси x ; u – скорость потока; c – скорость света, L – длина АС, Ω – апертура выходного зеркала, A_1^v – коэффициент Эйнштейна на переходе в полосе $v \rightarrow v-1$. В соответствии с (10) интенсивности излучения $I_{v,j}$ рассчитывались в каждой точке вдоль потока независимо, хотя в резонаторе обычно обеспечивается эффективное "перемешивание" излучения между различными его областями. Спектр излучения, рассчитанный с (10), содержит 2÷3 вращательные компоненты Р-ветви на каждом колебательном переходе. В одномерной модели также не учитывается изменение интенсивности вдоль оси резонатора (поперек потока). Для проверки точности данного приближения было проведено сопоставление результатов, полученных как с его использованием, так и с дифракционной моделью, описанной в работе [3А]. Было установлено, что при использовании в расчетах уравнений (10) удельный энергопотребление СО лазера завышается примерно на 3%. При этом дифракционная модель дает те же номера вращательных компонент Р-ветви, что и одномерное приближение вблизи оси резонатора.

Другое упрощение связано с приближенным учетом прямого нагрева газа в разряде, происходящего из-за потерь энергии электронов в столкновениях с тяжелыми частицами и при возбуждении вращений молекул, энергия которых быстро термализуется. Дело в том, что определение доли мощности накачки η_T , теряемой на прямой нагрев АС в разряде, путем решения уравнения Больцмана для ФРЭЭ приводит к значениям, заметно меньшим результатов измерений η_T в ряде экспериментальных работ. В разделе 2.4 описано состояние исследований по данной проблеме и отмечается, что разброс экспериментальных данных в условиях характерных для АС СО ЭИЛ соответствует диапазону $\eta_T \approx 0.1 \div 0.2$. В расчетах характеристик импульсных СО ЭИЛ использовалась $\eta_T = 0.15$.

Также как и в разработанных ранее теоретических моделях в расчетах игнорировалось наличие в АС молекул $C^{13}O^{16}$ и $C^{13}O^{18}$. В разделе 2.4 обосновывается, что указанное упрощение модели приводит к незначительному (на $2 \div 3\%$) завышению удельного энергопотребления ЭИ СО лазера. Результаты, изложенные в Главе 2, опубликованы в работах [1А, 2А, 4А, 5А, 10А, 14А, 17А, 20А-21А, 1Б, 4Б, 13Б].

Третья Глава диссертации посвящена анализу результатов зондирования КУСС в АС импульсного СО ЭИЛ, цели которого состояли в верификации теоретической модели путем сравнения теории с экспериментом в широком диапазоне колебательных переходов и в выявлении роли различных процессов в АС, влияющих на динамику КУСС. **В разделе 3.1** указывается на высокую чувствительность КУСС на фиксированном колебательно-вращательном переходе $(v, j-1) \rightarrow (v-1, j)$ для сравнительно низких значений j к отношению колебательных населенностей n_v / n_{v-1} , которое зависит от соотношения скоростей различных столкновительных и радиационных процессов в АС. Это позволяет исследовать роль отдельных процессов, влияющих на отношение n_v / n_{v-1} , путем обработки результатов измерений КУСС с использованием теоретической модели. Такие возможности описаны в Главе 3.

В разделе 3.2 сопоставляется теория с экспериментом по динамике КУСС на переходах фундаментальной полосы в смесях СО:Не и СО:N₂. Измерения КУСС в АС импульсного СО ЭИЛ с длительностью импульса накачки $\tau_{\text{disch}} \approx 30$ мкс выполнялись в широком диапазоне колебательных переходов с использованием пробного пучка излучения непрерывного частотно-селективного СО лазера [25А]. Эти данные, полученные с пространственным и с временным разрешением, гораздо более информативны, чем результаты измерений энергетических и спектральных характеристик СО лазера, которые, как правило, являются усредненными. При сопоставлении теории с экспериментом, в котором АС зондируется пробным пучком малой апертуры, важно использовать в расчетах те локальные значения параметров АС, которые реализуются в эксперименте. Поэтому сравнению теории и эксперимента предшествовала диагностика экспериментальной установки, включающая измерения распределений температуры газа и плотности тока ЭИ устройства по объему газоразрядной камеры (ГРК), зависимости тока разряда от времени.

Определение локальных значений удельного энерговклада Q в области АС, зондируемой пробным лучом, представляет известную проблему. В экспериментах измерялись начальное и конечное значения энергии в емкостном накопителе, что позволяло оценить энергию, вкладываемую в разряде. Средний по объему удельный энерговклад \bar{Q} определялся с использованием геометрического объема ГРК. Использование значений \bar{Q} для оценки локального энерговклада Q в области зондирования завышает его из-за игнорирования ряда факторов. Выявленная в эксперименте значительная пространственная неоднородность пучка высокоэнергетических электронов может приводить к пространственной неоднородности значений Q и к увеличению объема разряда по сравнению с объемом ГРК. Также надо учитывать неоднородность энерговклада в приэлектродных областях. Результаты пробных расчетов КУСС, в которых независимо варьировались значения Q и начальной температуры газа (T_0), существенно зависели от этих параметров. Т.к. распределение T_0 , также как и форма импульса накачки, были измерены в экспериментах достаточно надежно, то сопоставление расчетной и измеренной динамики КУСС позволило оценить величину Q в зондируемой области, исходя из лучшего согласия теории с экспериментом. В разделе 3.2 динамика КУСС на переходе $20 \rightarrow 19$ Р(12) при $\bar{Q}=105$ Дж/(л·Амага), измеренная для различных расстояний h от зондирующего луча до поверхности нижнего электрода, которым соответствуют различные значения T_0 , сопоставляется с результатами вычислений. Значения Q , для которых достигается хорошее согласие теории и эксперимента при разных h , отличаются друг от друга незначительно и составляют примерно $0.67\bar{Q}$. При увеличении \bar{Q} до $130 \div 150$ Дж/(л·Амага) согласие с экспериментом для смеси СО:Не=1:4 достигалось при $Q \approx 0.63\bar{Q}$, а при $\bar{Q}=240$ Дж/(л·Амага) при $Q \approx 0.6\bar{Q}$. Для примера, на Рис. 12 сопоставляются теория и эксперимент по динамике КУСС на переходах $7 \rightarrow 6$ Р(14) и $19 \rightarrow 18$ Р(13) при $\bar{Q}=240$ Дж/(л Амага).

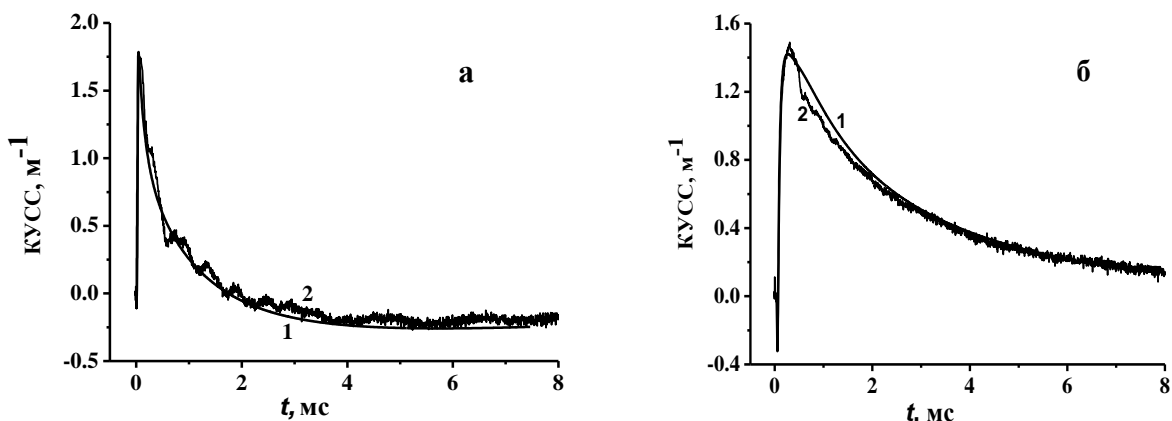


Рис. 12. Динамика КУСС на переходах: $7 \rightarrow 6$ Р(14) (а) и $19 \rightarrow 18$ Р(13) (б) [25А]; 1 –расчет; 2 -эксперимент; $T_0=110$ К, начальная плотность АС 0.1Амага.

Для смеси СО:N₂=1:9 значение Q также выбиралось, исходя из лучшего согласия расчетной и измеренной динамики КУСС. При $\bar{Q}=250$ Дж/(л·Амага)

наилучшее согласие по динамике КУСС на пяти переходах ($13 \rightarrow 12$ P(9, 15), $16 \rightarrow 15$ P(10, 14, 16)) достигнуто при $Q = 0.72 \bar{Q}$.

После уточнения локальных значений энергоклада в области АС, зондируемой пробным лазером, теоретическая модель хорошо описывает всю совокупность экспериментальных данных по динамике КУСС в широком диапазоне переходов, при различной плотности и разном составе АС. Это свидетельствует о надежности используемых в модели КС VV обмена и других кинетических коэффициентов.

В разделе 3.3 анализируются результаты диагностики КУСС в смеси СО:Не:О₂ при малых концентрациях О₂, выполненной для выявления роли молекул О₂ в процессах колебательного энергообмена в АС СО ЭИЛ. Актуальность такого исследования обусловлена тем, что кислород часто используют как добавку в АС электроразрядных СО лазеров; он также является технологической примесью в АС. Еще в работе [15], в которой измерялась стационарная КФР молекул СО в разряде постоянного тока в охлаждаемых жидким азотом смесях СО:Не:О₂=3:25:Х, было обнаружено, что при увеличении доли молекул О₂ в смеси с 1.5% до 7% населенности колебательных уровней $v \geq 20$ молекул СО значительно уменьшаются. Авторы работы [15] объясняли это исключительно процессами VT релаксации колебательно-возбужденных молекул СО на атомах О, нарабатываемых в разряде. Отмечу, что вследствие ангармонизма молекулярных колебаний колебательный квант молекулы СО на уровне $v=22$ близок к колебательному кванту молекулы О₂ на уровне $v=1$, что указывает на возможность быстрых квазирезонансных процессов VV' обмена между молекулами СО на высоких колебательных уровнях и молекулами О₂ на нижних уровнях:



Однако учет процессов (11) в теоретической модели затруднен из-за скудности данных о КС таких процессов. При $1 \leq v \leq 8$ значения этих КС характеризуются разбросом вплоть до нескольких порядков величины. Для $v=12, 13$ КС были измерены лишь для комнатной температуры газа, а для $v > 13$ данных нет. Диагностика КУСС в смесях СО:Не:О₂ при концентрациях кислорода от 0.4% до 4% была выполнена в работе [28А] при постоянном соотношении компонентов СО:Не=1:4, при плотности газа (ρ) 0.1 Амага и $T_0=110$ К. АС зондировалась излучением пробного лазера на отдельных колебательно-вращательных переходах молекулы СО в полосах от $v=7 \rightarrow 6$ до $v=24 \rightarrow 23$. Эксперименты выявили существенные отличия динамики КУСС при различном содержании О₂, наиболее заметные для высоких v . Изменения динамики КУСС вызваны, в основном, процессами (11), но роль кислорода в АС этим не ограничивается. В работе [28А] модель АС была модифицирована для более полного учета процессов с участием молекул О₂. Учитывались процессы энергообмена электронов с молекулами О₂, процессы VV обмена между молекулами О₂ и процессы (11). Начальный выбор КС процессов (11) был сделан, исходя из качественного подобия потенциалов взаимодействия для пар молекул СО-О₂ и СО-N₂, и при расчете КС за основу было взято выражение (7) для КС VV' процессов между СО и N₂. Слагаемое в (7), соответствующее

близкодействию, было опущено, т.к. при криогенных температурах и при $v > 16$ его вклад в КС примерно на порядок меньше вклада дальнего действия. При $v < 12$ вклад обоих слагаемых в (7) становятся сравнимым, но роль таких процессов малосущественна в условиях проведенных экспериментов. Поэтому для расчёта КС процессов (11) с молекулами O_2 на нижних колебательных уровнях использовалась приближенная формула:

$$K_{v,v-1}^{u,u+1} = Z \cdot \frac{b}{T} \cdot \frac{v}{1 - \delta_{CO} \cdot v} \cdot (u+1) \cdot \exp\left(\frac{\Delta E}{2 \cdot T}\right) \cdot \exp\left(-\frac{\Delta E^2}{C \cdot T}\right) \quad (12)$$

В этом выражении зависимость КС от температуры T и дефекта энергии ΔE задается параметрами b и C , первый из которых определяет КС резонансного VV' обмена, а второй – ширину резонансного пика зависимости от ΔE . В разделе 3.3 результаты расчетов динамики КУСС при малых добавках O_2 в АС сопоставляются с экспериментом. Для переходов между сравнительно низкими колебательными уровнями ($7 \rightarrow 6$, $10 \rightarrow 9$ и $14 \rightarrow 13$) расчетная динамика КУСС очень слабо зависит от параметров b и C . При этом согласие теории с экспериментом достигается практически при тех же значениях Q , что и в смеси $CO:He=1:4$, что указывает на слабое изменение характеристик разряда. Диагностика КУСС на переходах между более высокими уровнями выявила высокую чувствительность результатов к добавкам O_2 . Расчетная динамика КУСС на переходах $v \rightarrow v-1$ при $v \geq 18$ сильно зависела от выбора обоих параметров в (12), что иллюстрируют Рис. 13 и Рис. 14.

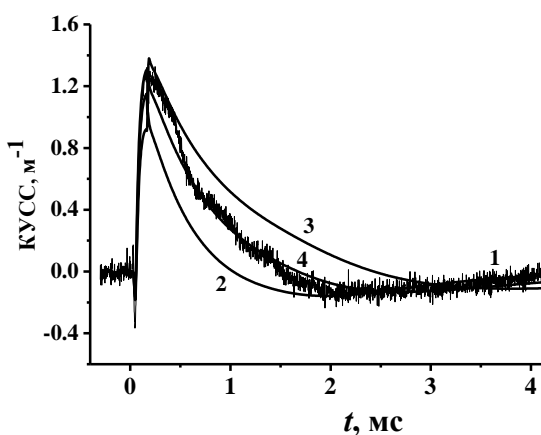


Рис. 13. Динамика КУСС. Переход $18 \rightarrow 17$ (P15); $\bar{Q}=240$ Дж/(л·Амага); $[O_2]=4\%$. 1 – эксперимент; 2, 3, 4 – расчет с $b=0.2$ К; 2 – $C=145$ К; 3 – $C=100$ К; 4 – $C=120$ К; [28А].

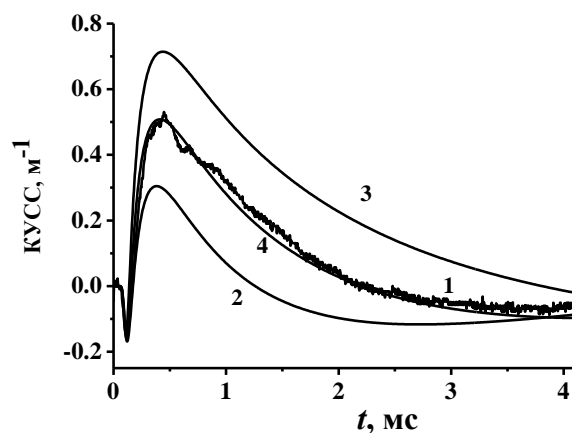


Рис. 14. Динамика КУСС. Переход $19 \rightarrow 18$ (P13); $\bar{Q}=130$ Дж/(л·Амага); $[O_2]=1.8\%$. 1 – эксперимент; 2, 3, 4 – расчет с $b=0.1$ К; 2 – $C=180$ К; 3 – $C=150$ К; 4 – $C=165$ К; [28А].

Легко видеть, что при заданном параметре b изменение C , не превышающее 20%, заметно изменяет динамику КУСС на переходах $v=18 \rightarrow 17$ P(15) и $v=19 \rightarrow 18$ P(13). Дело в том, что указанные переходы происходят между уровнями, расположенными несколько ниже уровней, на которых скорость VV' обмена максимальна ($v \geq 20$). Для таких переходов ширина резонанса в (12) является важным фактором. Параметры b и C в (12) были однозначно

определены путем минимизации целевой функции $\Phi(b, C) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L S_i^2(b, C)$ в двумерной области значений этих параметров. Здесь L – число анализируемых зависимостей КУСС(t) от времени на переходах 18→17 P(15), 19→18 P(13), 21→20 P(14), 24→23 P(15) при $[O_2] = (0.4 \div 4)\%$ и при $\bar{Q} = 130, 240$ Дж/(л·Амага). Функции $S^2(b, C) = \frac{\sum_{i=1}^K (G_{Th}(i) - G_{Exp}(i))^2}{\sum_{i=1}^K (G_{Exp}(i))^2}$ вычислялись для каждой измеренной зависимости КУСС(t), где K – длина последовательности $G_{Exp}(i)$ – измеренных значений КУСС и последовательности $G_{Th}(i)$ – результатов расчета КУСС для тех же моментов времени, в которые были измерены $G_{Exp}(i)$. Использование в расчетах АС уточненного выражения (12) позволило удовлетворительно описать результаты измерений динамики КУСС в смесях СО:Не:О₂ на переходах с верхним уровнем $v = (18 \div 24)$. В Таблице 1 приведены найденные таким образом при $T = 150$ К КС для нескольких процессов VV' обмена между молекулами СО на высоких колебательных уровнях и невозбужденными молекулами О₂.

Таблица 1. КС процессов СО(v)+О ₂ (0)→СО(v-1)+О ₂ (1) [28А]	v	$K_{v, v-1}^{0,1}$ (см ³ ·с ⁻¹)	v	$K_{v, v-1}^{0,1}$ (см ³ ·с ⁻¹)
	19	1.7×10^{-12}	22	6.1×10^{-12}
	20	3.1×10^{-12}	23	7×10^{-12}
	21	4.7×10^{-12}	24	6.9×10^{-12}

Найденные КС VV' обмена между СО и О₂ также верифицировались путем сравнения теории с экспериментом по КФР молекул СО в разряде постоянного тока в охлаждаемых жидким азотом смесях СО:Не:О₂ [30А]. Содержание О₂ в смеси варьировалось, но не превышало 2.5%. Сопоставление теории с экспериментом по КФР выявило их хорошее согласие при различном содержании молекулярного кислорода в смеси.

О корректности найденных КС процессов VV' обмена между молекулами СО на высоких колебательных уровнях и молекулами О₂ на нижних уровнях также свидетельствует выполненное в работе [33А] сопоставлении теории с экспериментом по характеристикам криогенного щелевого обертонового СО лазера с накачкой ВЧ разрядам, работающего на смесях СО:О₂:Не=1:Х:10. В экспериментах было обнаружено, что при использовании частотно-селективного резонатора, обеспечивающего возможность генерации в диапазоне $\lambda = (3 \div 3.5)$ мкм, мощность лазерного излучения быстро падает по мере увеличения концентрации О₂, а при содержании кислорода, соответствующем $X = 0.5$, генерация излучения после включения накачки не возникает. Выполненные в этой же работе расчеты динамики КУСС на переходах с колебательным квантовым числом верхнего лазерного уровня $v \geq 19$ выявили их сильную зависимость от содержания молекул О₂ в смеси. Расчетная концентрация кислорода в АС, при которой генерация излучения в указанном выше диапазоне не возникает, хорошо согласуется с экспериментом.

В разделе 3.4 рассмотрена возможность выявления по динамике КУСС роли процессов энергообмена между электронами и молекулами СО на высоких колебательных уровнях. Роль таких процессов неоднократно обсуждалась в связи с тем, что колебательная температура молекул СО в области «плато» КФР может (например, в ЭИ разрядах и в их послесвечении) превышать эффективную температуру электронов. В этом случае энергообмен электронов с молекулами на «плато» будет происходить с преобладанием процессов передачи энергии электронам, что может приводить к уменьшению колебательных населенностей и лазерной инверсии. На общий баланс энергии электронов эти процессы влияют слабо, т.к. доля молекул в области «плато» обычно не превышает 0.1%. Отсутствие экспериментальных данных о сечениях этих процессов затрудняет их учет в теоретической модели СО лазера. В разделе 3.4 обосновывается методика исследования указанных процессов непосредственно в активной среде СО ЭИЛ. Предложенная методика основана на использовании двух последовательных разрядных импульсов в АС СО ЭИЛ (см. в [19А]). В результате первого импульса формируется квазистационарная КФР с выраженным «плато» на высоких уровнях. Вторым разрядным импульсом подается после формирования квазистационарной КФР. Воздействие этого импульса на колебательные населенности молекул СО на высоких уровнях регистрируются по динамике КУСС на отдельных переходах. Для обоснования этой методики в работе [19А] выполнялись расчеты динамики КФР, результаты которых позволяют оценить условия, при которых роль $e-V$ процессов во втором импульсе становится заметной и появляется возможность для уточнения КС этих процессов. Расчеты выполнялись для следующих параметров АС: СО:Не=1:4, $T_0=100\text{K}$, $\rho=0.18$ Амага, удельный энерговклад в первом импульсе $Q_I=200$ Дж/(л·Амага). Для каждого импульса в расчетах использовалась прямоугольная форма импульсов тока и напряжения длительностью 30 мкс. В первом импульсе значение параметра E/N составляло $0.6 \cdot 10^{-16}$ В·см². Рассчитывалось воздействие повторного импульса, который включался через 150 мкс после включения первого, на КФР молекул СО и на динамику КУСС на отдельных переходах в зависимости от таких параметров этого импульса как напряженность поля и концентрация электронов в разряде. При одинаковых значениях этих параметров величина удельного энерговклада во втором импульсе (Q_{II}) столь же велика, как и в первом, а при учете расширения нагретого газа в буферный объем $Q_{II} > Q_I$. В этом случае динамика КФР на высоких уровнях при включении второго импульса определяется, в основном, не $e-V$ процессами, а быстрой передачей возбуждения с нижних уровней в процессах VV обмена. Чтобы ослабить этот канал передачи энергии предлагается уменьшать мощность второго разрядного импульса по сравнению с первым за счет уменьшения напряжения на разрядном промежутке. При этом для сохранения существенной роли прямого взаимодействия электронов с колебательно-возбужденными молекулами желательно, чтобы концентрация электронов во втором разрядном импульсе была не меньше, чем в первом. Такой режим можно реализовать во втором импульсе при увеличении плотности тока пучка высокоэнергетических электронов. Возможности использования лазерного зондирования АС для выявления прямого воздействия

e-V процессов на населенности молекул CO на высоких колебательных уровнях иллюстрируют графики, приведенные в разделе 3.4. Показана потенциально высокая чувствительность предложенной методики к скорости указанных процессов.

Результаты Главы 3, опубликованы в [19А, 25А, 28А, 30А, 33А, 17Б-18Б].

Глава 4 посвящена теоретическому исследованию характеристик импульсных ЭИ CO лазеров на переходах первого колебательного обертона с изменением колебательного квантового числа $\Delta v=2$ и фундаментальной (основной) полосы с $\Delta v=1$. Дается теоретический прогноз характеристик CO лазера на обертоме, проводится сопоставление теории и эксперимента. Кратко описано состояние исследований CO лазера на обертоме, характеристики которого могут представлять интерес для технологических применений. Генерация излучения CO лазера на обертоме в частотно-селективном режиме реализована более чем на 400 колебательно-вращательных переходах [16А] в интервале длин волн $\lambda=(2.5\div 4.2)$ мкм. Многие из них перекрываются с полосами поглощения атмосферных примесей [29А], а также с полосами многих органических и неорганических молекул, что делает данный лазер привлекательным для спектроскопии и различных приложений. Часть его спектра излучения попадает в «окно прозрачности» атмосферы с $\lambda=(3.3\div 4)$ мкм. В экспериментах получены сравнительно высокие КПД CO лазера на обертоме вплоть до 16% [26А]. Характеристики CO лазера на обертоме существенно отличаются от характеристик CO лазера на переходах основной полосы. Во-первых, КУСС на обертоме существенно меньше, чем на переходах основной полосы. Поэтому для эффективной генерации на обертоме необходим более добротный резонатор, чем для обычного CO лазера. Это иллюстрирует Рис. 15, на котором приведена расчетная динамика КУСС в АС CO лазера [29А] для ряда переходов на обертоме и в основной полосе с одинаковым верхним уровнем v .

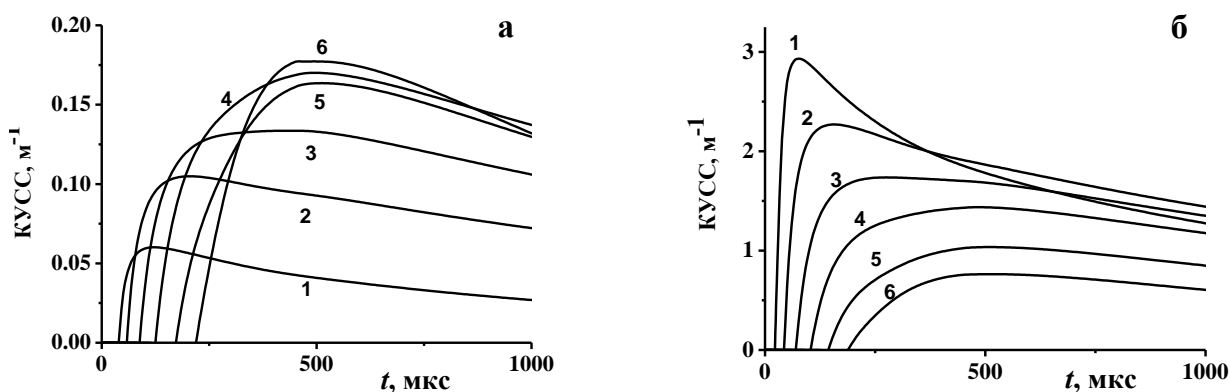


Рис. 15. Динамика КУСС на обертоме (а) и в основной полосе (б); $T_0=110$ К, $\text{CO}:\text{He}=1:4$, $\rho=0.1$ Амага, $E/N=1\cdot 10^{-16}$ В·см², длительность импульса накачки (τ_{disch}) 30 мкс, $Q=240$ Дж/(л·Амага); зависимости 1, 2, 3, 4, 5, 6 соответствуют: а– переходам $v \rightarrow v-2$ P(12); б – переходам $v \rightarrow v-1$ P(12); $v=10, 15, 20, 25, 30, 35$.

Максимальные значения КУСС на переходах в полосе $v \rightarrow v-2$ достигаются в области высоких v . Поэтому пороговые условия генерации на обертоме легче выполняются для переходов между высокими колебательными уровнями, на

которые и приходится основная доля энергии лазерного излучения. По этой же причине характеристики лазера на обертоном чувствительны к наличию в АС примесей, приводящих к обеднению населенностей высоких уровней в VV' и VT процессах. Генерация излучения на обертоном часто сопровождается генерацией и в основной полосе, возникающей на переходах между сравнительно низкими колебательными уровнями, в результате чего КПД лазера на обертоном может уменьшаться [29А]. Таким образом, для эффективной работы лазера на обертоном необходимо предъявлять жесткие требования к резонатору: он должен иметь высокую добротность для излучения на обертоном и обеспечивать подавление генерации в основной полосе. При использовании в резонаторе лазера на обертоном внешних отражателей надо учитывать, что в результате поглощение паров воды в атмосфере в полосе с $\lambda \approx 2.7$ мкм возможно уменьшение КПД и исчезновение генерации на коротковолновых переходах.

В разделе 4.1. выполнено сопоставление теории с экспериментом по характеристикам СО лазера на обертоном. На Рис. 16 расчетная динамика КУСС в полосе $v \rightarrow v-2$ для $v=20$ и $v=33$ сравнивается с результатами измерений КУСС методом калиброванных потерь в работе [18А].

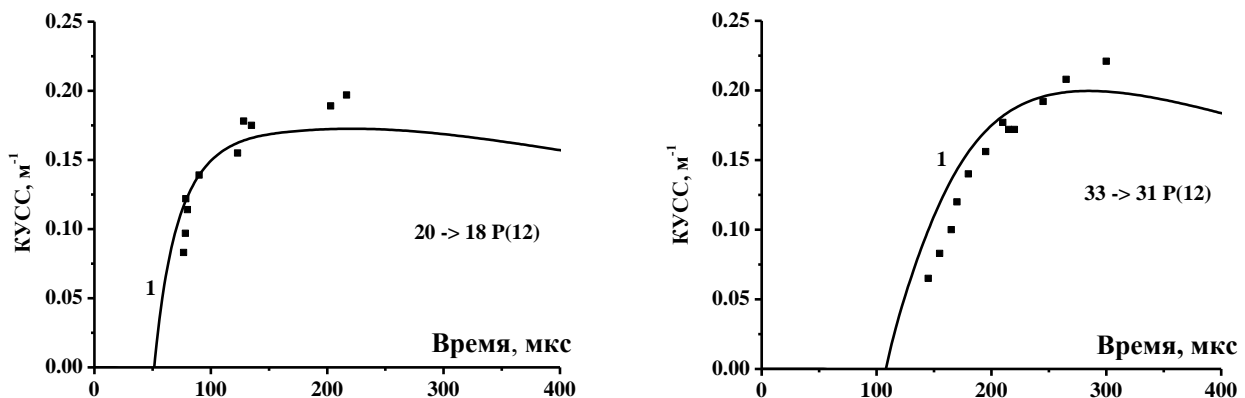


Рис. 16. Динамика КУСС на обертонных переходах. $Q=320$ Дж/(л·Амага), СО:Не=1:4, $\tau_{\text{disch}}=30$ мкс, $E/N=1 \cdot 10^{-16}$ В·см², $T_0=110$ К, $\rho=0.18$ Амага. 1 – результаты расчетов [29А], (■) – результаты экспериментов [18А].

Расчетная и экспериментальная зависимости КПД импульсного обертоного ЭИ СО лазера от удельного энергоклада приведены на Рис. 17.

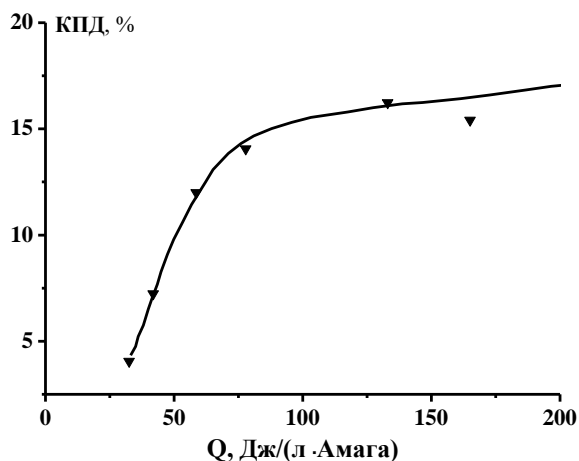


Рис. 17. Зависимость КПД СО ЭИЛ на обертоном от удельного энергоклада. СО:N₂:Не=1:9:10, $T_0=100$ К, $\rho=0.12$ Амага, $\tau_{\text{disch}}=30$ мкс; 1 – расчет, маркеры – эксперимент [26А].

Можно отметить их хорошее согласие при энергокладе до 150 Дж/(л·Амага). Согласие теории и эксперимента получено и по спектрам излучения лазера на обертоме. И в расчетах, и в экспериментах (см. [12А]) наблюдается чередование интенсивностей сильных и слабых колебательных полос в спектре излучения СО лазера, возникающее из-за радиационной независимости каскадов, связывающих излучением четные, либо нечетные колебательные уровни. Возникает это чередование главным образом из-за неравноправия двух каскадов, которое, как правило, всегда существует. В этом же разделе проводится сопоставление теории и эксперимента по энергии излучения СО лазера на обертоме в частотно-селективном режиме между предельно высокими колебательными уровнями вплоть до полосы $\nu=38 \rightarrow 36$ включительно [18А]. В экспериментах было обнаружено, что малые добавки молекулярного азота в АС, состоящую из смеси СО:Не, приводят к ослаблению генерации в полосе $\nu=38 \rightarrow 36$ и росту энергии в полосе $\nu=36 \rightarrow 34$. При увеличении содержания N_2 примерно до 9% генерация в полосе $\nu=38 \rightarrow 36$ полностью пропала, что удалось объяснить ролью процессов асимметричного обмена (6). Измеренная зависимость энергии излучения на переходах с колебательным квантовым числом верхнего лазерного уровня $\nu=36, 37, 38$ от концентрации молекул N_2 качественно верно описывается теорией.

Несмотря на сравнительно высокие КПД СО лазера на обертоме, достигнутые при криогенных температурах АС, исследователей продолжают интересовать характеристики этого лазера при комнатной температуре АС. В работе [16] исследовались характеристики импульсного СО ЭИЛ на обертоме с КПД, достигающим 1.5÷2% при температуре АС близкой к комнатной. Для выявления возможностей такого лазера в работе [29А] выполнялись расчеты с использованием параметров АС и резонатора, близких к параметрам из работы [16]. На Рис.18 приведена зависимость КПД от удельного энергоклада, рассчитанная без учета потерь резонатора на поглощение и рассеяние.

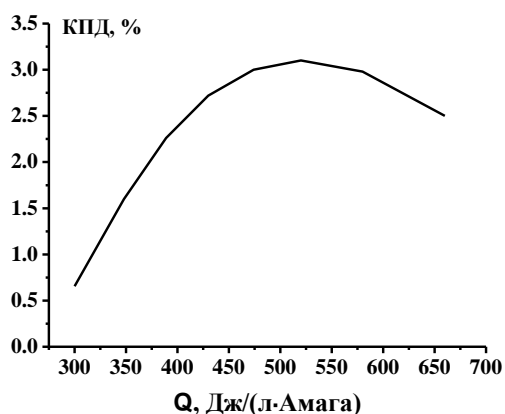


Рис. 18. Зависимость КПД СО ЭИЛ на обертоме с резонатором без потерь, от удельного энергоклада. $\rho=0.5$ Амага, смесь СО: N_2 :Не=12.5:37.5:50, $T_0=278K$, $\tau_{disch}=30$ мкс, $E/N=1.5 \cdot 10^{-16}$ В·см².

Доля энергии, выводимая из резонатора за полный обход (τ_0), составляла в этих расчетах 6% при длине АС по лучу 100 см. Учет пассивных потерь при неизменном пороговом значении коэффициента усиления в резонаторе приводит к уменьшению КПД в соответствии со множителем $\tau/\tau_0=(\tau_0-p)/\tau_0$, где τ и p – доли излучения, выводимые из резонатора и теряемые на пассивные потери за полный обход, соответственно. Оценка величины p на основании

результатов работы [16] составила $2 \div 3\%$. В этом случае расчетный КПД СО лазера при рассмотренных условиях равен $1.5 \div 2\%$, что согласуется с экспериментом. В спектре излучения на обертоном, рассчитанном при $Q=480$ Дж/(л·Амага), нет переходов в полосах $v \rightarrow v-2$ с $v > 23$, что отражает возросшую с температурой роль процессов VT релаксации.

Раздел 4.2. посвящен теоретическому исследованию характеристик частотно-селективного импульсного СО ЭИЛ в зависимости от ширины и расположения «спектрального окна» селективного резонатора – спектрального диапазона, в котором возможна генерация излучения. Полученный в расчетах прогноз позволяет судить об энергии выходного излучения перестраиваемого частотно-селективного лазера на одном колебательно-вращательном переходе и об энергии излучения при генерации на нескольких переходах в узком спектральном диапазоне. Расчеты выполнялись как для СО лазера на обертоном, так и для СО лазера на переходах основной полосы [22А, 23А], который может работать в частотно-селективном режиме в широком диапазоне полос $v \rightarrow v-1$ с $v \leq 39$. Прогноз энергетических характеристик частотно-селективного СО лазера на отдельных колебательно-вращательных переходах с $\lambda=(5 \div 8.7)$ мкм важен для многих задач (см., например, в [17, 18]).

Рассматривались случаи, когда генерация происходит на переходах с фиксированным вращательным числом $J=12$ в одной, трёх и пяти соседних полосах $v \rightarrow v-2$ (или $v \rightarrow v-1$), с нижним лазерным уровнем в диапазоне от 5 до 37. Расчеты проводились для следующих параметров АС: СО: $N_2=1:9$, $T_0=100$ К, $\rho=0.2$ Амага, $Q=200$ Дж/(л·Амага) при длительности накачки 30 мкс и неизменном значении $E/N = 1 \cdot 10^{-16}$ В·см². Предполагалось, что доля излучения, выводимая за полный обход резонатора, составляет 10% для всех переходов в «спектральном окне» при длине АС по лучу 1 м. Пассивные потери излучения в резонаторе со средой не учитывались. Расчетные КПД лазера на обертоном при генерации на одном, трёх и пяти последовательных переходах в зависимости от v_L - номера самого нижнего лазерного уровня в каждом из указанных случаев приведены на Рис. 19.



Рис. 19. КПД генерации на обертоном в «спектральном окне» [22А]; (а) – генерация на одном переходе; (б) – генерация на трех последовательных переходах; (в) – генерация на пяти переходах. Маркеры – расчет с ОКО.

С ростом числа переходов в «спектральном окне» КПД лазера увеличивается для всех $\nu_L < 34$, что связано с более полным перехватом потока колебательных квантов в излучение. При $\nu_L \geq 34$ рост числа переходов в «спектральном окне» резонатора не влияет на КПД, так как верхние уровни с $\nu > \nu_L$ существенно опустошены за счёт передачи энергии на нижние уровни молекул N_2 и CO в процессах (6), (8). Использование физически обоснованной модели МКО позволило существенно уточнить прогноз характеристик CO ЭИЛ, работающих в частотно-селективном режиме на переходах между сравнительно высокими колебательными уровнями. Эффект от более корректного описания процессов VV обмена можно видеть из Рис. 19, на котором маркерами обозначены результаты расчетов, выполненных в модели ОКО [22А]. При использовании этой модели заметно занижается расчетный КПД генерации для переходов с $\nu_L > 10$. Этот эффект связан главным образом с учетом в модели МКО процессов асимметричного VV обмена, приводящих к дополнительной накачке лазерных уровней и к меньшему нагреву газа. Интересно сопоставить значения КПД на отдельном переходе, полученные в расчетах селективной генерации и для многочастотной генерации с максимально широким спектром. Спектр генерации, полученный в таких расчетах при тех же параметрах АС и добротности резонатора, при которых были рассчитаны зависимости а, б, в на Рис.19, приведен на Рис.20.

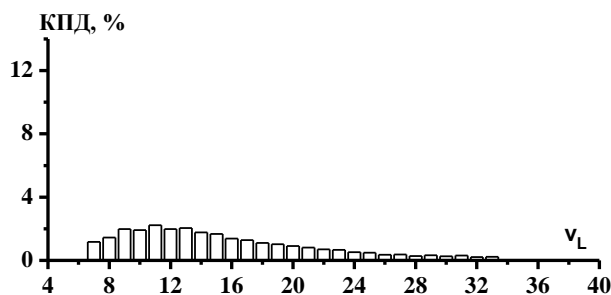


Рис. 20.
Спектр многочастотной генерации на переходах $\nu \rightarrow (\nu-2) P(12)$, [29А].
На графике $\nu_L = (\nu-2)$.

Высота каждого столбца в этом спектре равна КПД генерации на одном переходе. Сравнение результатов на Рис. 19 и 20, позволяет заключить, что использование узкополосных резонаторов может привести к значительному росту энергии излучения на обертоном на отдельном переходе или на нескольких последовательных переходах в узком спектральном диапазоне, по сравнению с энергией, излучаемой при многочастотной генерации на этом переходе или в данном диапазоне. Вблизи длинноволновой границы спектра рост энергии излучения может быть многократным. Этот эффект вполне понятен: в селективном режиме при отсутствии генерации на более низко расположенных переходах на лазерные уровни передается больше колебательных квантов. Такой же вывод был сделан и для CO лазера в основной полосе, для которого, однако, имеется заметное отличие: в частотно-селективном режиме он может эффективно работать на большом числе переходов между высокими уровнями, отсутствующих в спектре неселективной генерации. Также исследовался вопрос, как растёт КПД лазера при дальнейшем увеличении ширины «спектрального окна». Номера вращательных компонент Р-ветви переходов в этих расчетах также были одинаковы ($J=12$). Положение центрального перехода

(в полосе $\nu_c \rightarrow \nu_c - 1$ либо $\nu_c \rightarrow \nu_c - 2$) в расчетах было зафиксировано ($\nu_c = 22$), а ширина «спектрального окна» менялась за счет добавления переходов, расположенных симметрично относительно центрального перехода. Результаты этих расчетов приведены на Рис. 21.

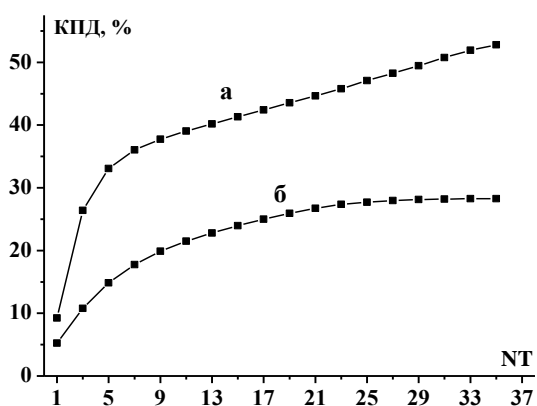


Рис. 21. Зависимости КПД СО лазера от числа переходов (NT) в «спектральном окне» с центральным переходом $\nu = 22 \rightarrow 21$ P(12) либо $\nu = 22 \rightarrow 20$ P(12) [22A]: а – генерация в основной полосе; б – генерация на обертоне. $\text{CO:N}_2 = 1:9$, $T_0 = 100$ К, $Q = 200$ Дж/(л·Амага), $\rho = 0.2$ Амага.

Можно отметить быстрый рост КПД на начальных участках рассчитанных зависимостей. Например, при генерации на 5 соседних обертоновых переходах значение КПД превышает 1/2 от максимального значения, равного 28%. С учетом сделанного выше замечания о влиянии на КПД величины пассивных потерь в резонаторе верхний предел для КПД СО лазера на обертоне будет ниже, чем на Рис.21. Так при пассивных потерях $\approx 2\%$ на полный обход резонатора, параметры которого указаны выше, расчетное значение максимального КПД близко к 20%.

Характеристики частотно-селективной генерации могут заметно меняться при изменении состава АС. В работе [23А] изучались характеристики частотно-селективного перестраиваемого СО лазера работающего в одночастотном режиме (на отдельных колебательно-вращательных переходах) на обертоне или в основной полосе при использовании смесей CO:He:N_2 и CO:Ar:N_2 . В частности было установлено, что в смесях CO:He , CO:Ar , не содержащих N_2 , расчетный диапазон перестройки расширяется в длинноволновую область на 3 колебательных перехода по сравнению с приведенным на Рис.19а спектром, рассчитанным с моделью МКО. Указанное расширение диапазона перестройки может оказаться существенным при генерации на обертоне на предельно высоких переходах с длиной волны $\lambda \geq 4$ мкм и на переходах в основной полосе с длиной волны $\lambda \geq 8$ мкм.

Представленный выше теоретический прогноз не позволяет судить о возможностях практического использования излучения частотно-селективных импульсных СО ЭИЛ, т.к. содержит лишь результаты расчетов их энергетических характеристик. На практике исследователей часто интересует форма импульса генерации, т.к. во многих приложениях требуется высокая интенсивность излучения. В разделе 4.2.3 представлены результаты расчетов динамики частотно-селективной генерации импульсных СО ЭИЛ на отдельных колебательно-вращательных переходах, выполненных в работе [34А] для широкого диапазона переходов основной полосы и первого колебательного обертона. В расчетах использовались те же параметры АС и селективного

резонатора, что и при расчетах энергетических характеристик, результаты которых приведены выше. Из результатов расчетов следует, что с увеличением номера верхнего лазерного уровня ν длительность импульса частотно-селективной генерации сильно возрастает, а интенсивность излучения падает. Так, например, длительность импульсов по уровню 0.5 максимальной мощности ($\tau_{0.5}$), рассчитанная для переходов $\nu=7 \rightarrow 6$ P(12), $\nu=20 \rightarrow 19$ P(12) и $\nu=27 \rightarrow 26$ P(12), составила соответственно 36 мкс, 316 мкс и 488 мкс. Изменения формы импульсов селективной генерации на обертоном по мере роста ν аналогичны тем, которые характерны и для селективной генерации на переходах основной полосы. Так для переходов $\nu=10 \rightarrow 8$ P(12), $\nu=14 \rightarrow 12$ P(12), $\nu=24 \rightarrow 22$ P(12) и $\nu=34 \rightarrow 32$ P(12) длительности импульсов генерации $\tau_{0.5}$ составили, соответственно, 40.1, 91.8, 441.9 и 511.4 мкс. При необходимости повышения мощности селективной генерации на переходах между высокими колебательными уровнями следует принимать меры для ускорения процессов VV обмена, обеспечивающих накачку лазерных уровней. В частности, этого можно добиться при увеличении плотности АС и при неизменной величине удельного энерговклада на молекулу. Это подтвердили представленные в разделе 4.2.3 результаты. При увеличении плотности активной среды с 0.2 до 0.8 Амага и сохранении удельного энерговклада максимальная расчетная мощность излучения на переходах с верхним лазерным уровнем $\nu > 20$ возросла более чем на порядок.

Результаты Главы 4 содержатся в работах [6А, 7А-9А, 11А-13А, 15А-16А, 18А, 22А-24А, 26А, 29А, 34А, 2Б, 6Б, 9Б, 11Б, 14Б].

В Приложении I представлены 6 таблиц с результатами расчетов КС процессов VV' и VV обмена для пар молекул CO-N₂ и N₂-N₂ в температурном диапазоне T=(200÷2900) К, опубликованные в [31А]. **Приложение II** содержит 5 таблиц с КС VV обмена между молекулами CO для (T=100÷500) К. Часть этих данных была рассчитана в [21А], часть данных заимствована из работы [6].

В заключении изложены основные результаты работы:

1. На основе результатов полуклассических вычислений констант скорости для большого числа одноквантовых, многоквантовых и асимметричных процессов колебательного энергообмена в смеси газов CO:N₂ сформированы матрицы констант скорости, наиболее корректно на сегодняшний день описывающих эти процессы.

2. Разработана теоретическая модель электроразрядного СО лазера, основанная на использовании указанных матриц констант скорости и позволяющая учитывать при расчетах лазерных характеристик совокупность процессов VV и VV' обмена с разным числом обмениваемых квантов в широком диапазоне колебательных уровней молекул СО ($\nu=0 \div 48$) и молекул N₂ ($\nu=0 \div 44$).

3. Выполнена верификация теоретической модели путем сравнения результатов расчетов с экспериментальными данными по константам скорости процессов VV и VV' обмена и по характеристикам СО лазера на переходах основной полосы и обертона в спектральных диапазонах (5.0÷8.7) мкм и (2.5÷4.2) мкм, соответствующих переходам с верхними лазерными уровнями $\nu=(5 \div 39)$.

4. С использованием этой модели обоснован прогноз КПД СО лазера на обертоном на уровне 20%. При узкополосной генерации на переходах основной полосы или обертона в пяти соседних полосах с колебательным числом самого верхнего лазерного уровня от $v=17$ до $v=36$ КПД СО лазера может достигать 50% от значений КПД в неселективном режиме.
5. Показана существенно лучшая применимость новой теоретической модели по сравнению с разработанными ранее моделями для описания характеристик электроразрядных СО лазеров, работающих в частотно-селективных режимах на переходах между высокими колебательными уровнями с $v>14$
6. Определены и верифицированы константы скорости процессов VV' обмена между молекулами СО на уровнях $v=(18\div 24)$ и молекулами O_2 на нижних уровнях, способных оказывать сильное влияние на характеристики СО лазера на переходах между высокими колебательными уровнями. Выполнено обобщение теоретической модели СО лазера, позволяющее учесть эти процессы при расчетах лазерных характеристик при наличии добавок O_2 с относительной концентрацией $0.05 < ([O_2]/[CO]) < 0.2$ в активной среде.
7. Анализ результатов расчетов характеристик частотно-селективных СО лазеров показал, что процессы асимметричного квазирезонансного VV и VV' обмена двух квантов молекулы СО на высоких колебательных уровнях на один квант молекул СО или N_2 на нижних уровнях ограничивают ИК границы спектров излучения СО лазера на основных и обертоновых переходах на уровне 8.9 и 4.3 мкм, что соответствует переходам с верхним лазерным уровнем $v<41$.

Цитируемая литература

1. Cacciatore M., Billing G.D. Semiclassical calculations of VV and VT rate coefficients in CO // *Chemical Physics*. 1981. V. 58, P. 395-407
2. Billing G.D., Cacciatore M. On the importance of multiquantum VV transitions in CO // *Chemical Physics Letters*. 1983. V.94, no.2. P.218-221
3. Billing G.D. Vibration/vibration energy transfer in CO colliding with $^{14}N_2$, $^{14}N^{15}N$ and $^{15}N_2$ // *Chemical Physics*. 1980. V. 50, P. 165-173
4. Billing G.D., Fisher E.R. VV and VT coefficients in N_2 by a quantum-classical model // *Chemical Physics*. 1979. V. 43, P. 395-401
5. Billing G.D. Semiclassical theory for diatom-diatom collisions // *Chemical Physics Letters*. 1983. V. 97, P. 188-192
6. Coletti C. and Billing G.D. Rate constants for energy transfer in carbon monoxide // *The Journal of Chemical Physics*. 2000. V. 113, P. 4869-4875
7. Ling S.H., Rigby M. An intermolecular potential for nitrogen // *Molecular Physics*. 1984. V. 51, P. 855-882
8. Allen D.C., Simpson C.J.S.M. Vibrational energy exchange between CO and the isotopes of N_2 between 300 K and 80 K // *Chemical Phys.* 1980. V. 45, P. 203-211
9. Акишев Ю.С., Демьянов А.В., Кочетов И.В. и др. Определение констант колебательного обмена в N_2 по нагреву газа // *ТВТ*. 1982. Т. 20, С. 818-827
10. Ahn T., Adamovich I.V., Lempert W.R. Determination of nitrogen V-V transfer rates by stimulated Raman scattering // *Chemical Physics*. 2004. Т. 298, P. 233-240
11. Smith N.S. and Hassan H.A. Power calculations for high-flow CO electric discharge laser systems // *AIAA Journal*. 1976. V. 14, P. 374-381

12. Capitelli M., Ferreira C.M., Gordiets B.F., Osipov A.I., “*Plasma Kinetics in Atmospheric Gases*”, Springer-Verlag (2000)
13. Brechignac Ph. Near-resonant V-V transfer rates for high-lying vibrational states of CO // *Chemical Physics*. 1978. V. 34, С. 119-134
14. Конев Ю.Б., Кочетов И.В., Певгов В.Г., Шарков В.Ф. Анализ кинетических процессов, определяющих параметры СО лазеров// Препринт ИАЭ №2821, М. 1977. 36С.
15. Fisher E.R, Lightman A.J. CO vibrational distributions in the presence of oxygen// *Journal of Applied Physics*.1978. V. 49, P. 530-532
16. Zeyfang E., Mayerhofer W., Walther S. Room-temperature repetitively pulsed CO overtone laser // *Proceedings of SPIE*. 2001. V. 4184, P. 230-233
17. Eerkens J.W. Spectral considerations in the laser isotope separation of uranium hexafluoride// *Applied Physics*. 1976. V. 10, P. 15-31
18. Urban W. Physics and spectroscopic applications of carbon monoxide lasers. A revue. // *Infrared Physics & Technology*. 1995. V. 36, P. 465-473

Публикации по теме диссертации в рецензируемых научных журналах

- 1А.** Конев Ю.Б, Курносов А.К. О тепловыделении в несамостоятельном разряде в окиси углерода//*Теплофизика высоких температур*. 1988. т.26, №4. с.651-654
- 2А.** Гурашвили В.А., Демьянов А.В., Жданок С.А., Кочетов И.В., Курносов А.К., Напартович А.П. Сравнительный анализ дозвуковой и сверхзвуковой схемы быстропроточного СО-ЭИЛ // *Инженерно-физический журнал*. 1988. т. 55, №1. с.37-41
- 3А.** Elkin N.N., Kochetov I.V., Kurnosov A.K., and Napartovich A.P. Two-dimensional diffraction calculations for a fast-flow CO laser // *Soviet Laser Research Journal*. 1992. v. 13. p.46-54
- 4А.** Konev Yu.B., Kochetov I.V., Kurnosov A.K. and Mirzakarimov B.A. A kinetic model of multi-quantum vibrational exchange in CO // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 1994. v. 27. p. 2054-2059
- 5А.** Конев Ю.Б., Кочетов И.В., Курносов А.К., Мирзакаримов Б.А. Расчет кинетики СО-лазера с учетом многоквантового VV-обмена // *Квантовая электроника*. 1994. т. 21, № 2. с. 133-136
- 6А.** Белых А.Д., Гурашвили В.А., Напартович А.П., Кочетов И.В., Курносов А.К., Путилин В.М., Туркин Н.Г. Импульсный СО-лазер на первом колебательном обертоне // *Квантовая электроника*. 1995. т. 22, № 4. с. 333-340
- 7А.** Ionin A.A., Kotkov A.A., Kurnosov A.K., Napartovich A.P, Seleznev L.V., Turkin N.G. Parametric study of first-overtone CO laser with suppressed fundamental band lasing: experiment and theory// *Optics Communications*. 1998. v.155. p. 197-205
- 8А.** Ionin A.A., Kotkov A.A., Kurnosov A.K., Napartovich A.P., Seleznev L.V., Turkin N.G. Pulsed first-overtone CO-laser: effective source of IR radiation in spectral range of 2.5-4.0 μm // *Optics Communications*. 1999. v. 160. p. 255-260
- 9А.** Basov N., Hager G., Ionin A., Kotkov A., Kurnosov A., McCord J., Napartovich A., Seleznev L., Turkin N. Pulsed first-overtone CO laser with output efficiency higher than 10% // *Optics Communications*. 1999. v. 171. p.107-112
- 10А.** Ионин А.А., Климачев Ю.М., Конев Ю.Б., Кочетов И.В., Курносов А.К.,

- Синицын Д.В. Внутррезонаторное взаимодействие селективных по частоте коротких импульсов излучения СО-лазера с колебательно-возбужденной активной средой // *Известия академии наук. Сер. Физ.* 1999. т.63, № 4. с. 676-682
- 11А.** Basov N.G., Hager G.D., Ionin A.A., Kotkov A.A., Kurnosov A.K., McCord J.E., Napartovich A.P., Seleznev L.V., Turkin N.G. Efficient pulsed first-overtone CO laser operating within the spectral range of 2.5-4.2 μm // *IEEE Journal of Quantum Electronics*. 2000. v. 36. p. 810-823
- 12А.** Ionin A., Kotkov A., Kurnosov A., Napartovich A., Seleznev L., Turkin N. Alternation of vibrational band intensities in multiline pulsed first-overtone CO laser spectrum // *Optics Communications*. 2000. v. 178. p. 377-381
- 13А.** Basov N.G., Hager G.D., Ionin A.A., Kotkov A.A., Kurnosov A.K., McCord J.E., Napartovich A.P., Seleznev L.V., Turkin N.G. Frequency tunable single-line pulsed first-overtone carbon monoxide laser // *Optics Communications*. 2000. v. 180. p. 285-300
- 14А.** Ионин А.А., Климачев Ю.М., Конев Ю.Б., Курносков А.К., Напартович А.П., Синицын Д.В., Терехов Ю.В. Многоквантовый колебательный обмен высоковозбужденных молекул окиси углерода // *Квантовая электроника*. 2000. т. 30, № 7. с. 573-579
- 15А.** Басов Н.Г., Ионин А.А., Котков А.А., Курносков А.К., МакКорд Дж.Е., Напартович А.П., Селезнев Л.В., Туркин Н.Г., Хагер Г.Д. Импульсный лазер на первом колебательном оберitone молекулы СО, действующий в спектральном диапазоне 2.5-4.2 мкм.1. Многочастотный режим генерации // *Квантовая электроника* 2000. т. 30, №9. с. 771-777
- 16А.** Басов Н.Г., Ионин А.А., Котков А.А., Курносков А.К., МакКорд Дж.Е., Напартович А.П., Селезнев Л.В., Туркин Н.Г., Хагер Г.Д. Импульсный лазер на первом колебательном оберitone молекулы СО, действующий в спектральном диапазоне 2.5-4.2 мкм. 2. Частотно-селективный режим // *Квантовая электроника* 2000. т. 30, №10. с. 859-866
- 17А.** Ionin A.A., Klimachev Yu.M., Konev Yu.B., Kotkov A.A., Kurnosov A.K., Napartovich A.P., Seleznev L.V., Sinitsyn D.V., and Terekhov Yu.V. Theoretical modeling and experimental studies of the multi-quantum vibrational exchange in vibrationally excited CO molecules // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2001. v.34. p. 2230-2236
- 18А.** Басов Н.Г., Ионин А.А., Климачев Ю.М., Котков А.А., Курносков А.К., МакКорд Дж.Е., Напартович А.П., Селезнев Л.В., Синицын Д.В., Хагер Г.Д., Шнырев С.Л. Импульсный лазер на первом колебательном оберitone молекулы СО, действующий в спектральном диапазоне 2.5-4.2 мкм. 3. Коэффициент усиления и кинетические процессы на высоких колебательных уровнях // *Квантовая электроника*. 2002. т. 32, №5. с. 404-410
- 19А.** Кочетов И.В., Курносков А.К., Напартович А.П., Шнырев С.Л. Возможность выявления роли нерезонансного обмена энергией между электронами и молекулами СО на высоких колебательных уровнях // *Физика плазмы*. 2002. т. 28, №12. с. 1128-1134
- 20А.** Kurnosov A., Cacciatore M. and Billing G. D. State-to-state rate constants calculations for V-V energy transfer in CO-N₂ collisions // *The Journal of Physical Chemistry A.*, 2003. v. 107. p. 2403-2410

- 21A.** Billing G.D., Coletti C., Kurnosov A.K. and Napartovich A.P. Sensitivity of molecular vibrational dynamics to energy exchange rate constants // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. 2003. v. 36. p. 1175-1192
- 22A.** Курносов А.К., Напартович А.П., Шнырев С.Л. Численное исследование эффективности генерации СО лазера на обертоновых или основных переходах в зависимости от ширины спектра генерации // *Квантовая электроника*. 2004. т.34, №1. с. 1-6
- 23A.** Cacciatore M., Kurnosov A., Napartovich A. and Shnyrev S. Vibrational energy exchanges between N₂ and strongly excited CO molecules: their role in vibrational kinetics//*Journal of Physics B: Atom. Mol. & Opt. Physics*. 2004. v. 37. p. 3379-3398
- 24A.** Cacciatore M., Kurnosov A., Napartovich A. Vibrational energy transfer in N₂-N₂ collisions: a new semiclassical study // *The Journal of Chemical Physics*. 2005. v.123. p. 174315-1-174315-10
- 25A.** Ветошкин С.В., Ионин А.А., Климачев Ю.М., Козлов А.Ю., Котков А.А., Курносов А.К., Напартович А.П., Рулев О.А., Селезнев Л.В., Сеницын Д.В., Шнырев С.Л. Динамика коэффициента усиления в активной среде импульсного электроионизационного СО лазера: теория и эксперимент // *Квантовая электроника*. 2005. т. 35, №12. с. 1107-1112
- 26A.** Ионин А.А., Климачев Ю.М., Козлов А.Ю., Котков А.А., Курносов А.К., Напартович А.П., Рулев О.А., Селезнев Л.В., Сеницын Д.В., Хагер Г., Шнырев С.Л. Импульсный обертоновый СО лазер с КПД 16% // *Квантовая электроника*. 2006. т.36, №1. с. 1153-1154
- 27A.** Kurnosov A., Napartovich A., Shnyrev S., and Cacciatore M. Vibrational energy exchanges in nitrogen: application of new rate constants for kinetic modeling //*The Journal of Physical Chemistry A*. 2007. v. 111. p. 7057-7065
- 28A.** Ионин А.А., Климачев Ю.М., Козлов А.Ю., Котков А. А., Курносов А.К., Напартович А.П., Шнырев С.Л. Влияние малых добавок кислорода на временную динамику коэффициента усиления слабого сигнала в активной среде импульсного электроионизационного СО-лазера// *Квантовая электроника*. 2008. т. 38, №9. с. 833-839
- 29A.** Ionin A.A., Kurnosov A.K., Napartovich A.P., Seleznev L.V. Lasers on overtone transitions of carbon monoxide molecule // *Lasers Physics*. 2010. v. 20. p.144-186
- 30A.** Grigoryan G.M., Kochetov I.V., Kurnosov A.K. Vibrational distributions of CO molecules in a dc discharge in the presence of molecular oxygen admixture // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2010. v. 43. p. 1-6
- 31A.** Kurnosov A.K., Napartovich A.P., Shnyrev S.L. and Cacciatore M.A Database for V-V state-to-state rate constants in N₂-N₂ and N₂-CO collisions in a wide temperature range: dynamical calculations and analytical approximations// *Plasma Sources Science and Technology*. 2010. v. 19. p. 045015-1-045015-13
- 32A.** Гурашвили В.А., Занозина Е.М., Кочетов И.В., Курносов А.К., Спицын Д.И. Двумерная модель активной среды быстропроточного СО-лазера с учетом поуровневой колебательной кинетики // *Квантовая электроника*. 2012. т. 42, №1. с. 21-26
- 33A.** Ионин А.А., Козлов А.Ю., Кочетов И.В., Курносов А.К., Напартович А.П., Рулев О.А., Сеницын Д.В. Влияние добавок молекулярного кислорода на

коэффициент усиления и генерационные характеристики криогенного щелевого обертонового СО-лазера с накачкой ВЧ разрядом // *Квантовая электроника*. 2018. т. 48, №7. с. 596-602

34А. Курносоев А.К., Напартович А.П. Динамика частотно-селективной генерации СО-лазера, перестраиваемого в широком спектральном диапазоне // *Квантовая электроника*. 2019. т. 49, №2. с. 98-102

Публикации по теме диссертации в материалах международных конференций

1Б. Konev Yu.B., Kochetov I.V., Kurnosov A.K., Mirzakarimov B.A. Multiquantum vibrational exchange CO laser kinetic model // 9th International Symposium on Gas Flow and Chemical Lasers, Heraclion, Greece | September 21, 1992. Proceedings of SPIE. V.1810, p.88-91 (May 4, 1993)

2Б. Belykh A.D., Gurashvili V.A., Kochetov I.V., Kurnosov A.K., Napartovich A.P., Putilin V.M. Pulsed overtone laser: theory and experiment // Modelling and Simulation of Laser System III, Los-Angeles, CA, USA | January 1994. Proceedings of SPIE. V. 2117-14, p.136-147 (April 1, 1994)

3Б. Napartovich A.P., Gurashvili V.A., Kochetov I.V., Kuzmin V.N., Kurnosov A.K., Loboiko A.I., Turkin N.G. Cryogenic high-power CO laser pumped by e-beam sustained discharge: theory and experiment // Gas and Chemical Lasers and Intense Beam Applications, 1996, San Jose, USA, | January 27, 1996. Proceedings of SPIE. V.2702, p.420-431 (March 29 1996)

4Б. Ionin A.A., Klimachev Yu.M., Sinitsyn V.D., Kurnosov A.K., Kochetov I.V., Konev Yu.B. Multi-quantum VV-exchange modelling of the pulsed Q-switched frequency selected CO laser // XI International Symposium on Gas Flow and Chemical Lasers and High Power Laser Conference, Edinburgh, UK | August 25, 1996. Proceedings of SPIE. V.3092, p.301-304 (April 4, 1997)

5Б. Klimachev Yu.M., Ionin A.A., Sinitsyn D.V., Konev Yu.B., Kurnosov A.K., Kochetov I.V. Double pulse lasing in single line Q-switched CO laser // Proceedings of the International Conference LASERS'97 New Orleans, LA, USA, 1997. V.J. Corcoran, T.A. Goldman (Eds.) STS Press/McLean, VA, 1998, p.88-91

6Б. Ionin A.A., Kotkov A.A., Kurnosov A.K., Napartovich A.P., Seleznev L.V., Turkin N.G. Parametric study of first overtone CO laser with suppressed fundamental band lasing: Experiment and theory // Proceedings of the International Conference LASERS'97, New Orleans, LA, USA, 1997, V.J. Corcoran, T.A. Goldman (Eds.) STS Press McLean, VA, 1998, p.92-99

7Б. Andrei A. Ionin; Andrei A. Kotkov; Alexander K. Kurnosov; Anatoly P. Napartovich; Leonid V. Seleznev; Nikolay G. Turkin Parametric study of a first overtone CO laser with suppressed fundamental band lasing: experiment and theory // Gas and Chemical Lasers and Intense Beam Applications. Proceedings of SPIE. V.3268, p.9-17 (May 12, 1998)

8Б. Ionin A.A., Kotkov A.A., Kurnosov A.K., Napartovich A.P., Seleznev L.V., Turkin N.G. First overtone CO laser with suppressed fundamental band lasing // Conference on Lasers and Electro-Optics Europe (CLEO/Europe – EQEC'98) Glasgow, United Kingdom, 14-18 September, 1998. Technical Digest, p.332

9Б. Basov N.G., Hager G.D., Ionin A.A., Kotkov A.A., Kurnosov A.K., McCord

- J.E., Napartovich A.P., Seleznev L.V., Turkin N.G. Effective multiline pulsed first-overtone CO laser operating in spectral range of 2.5-4.1 μm // Proceedings of International Conference LASERS'98, Tucson, AZ, USA, 1998, V.J. Corcoran, T.A. Goldman (Eds.) STS Press, McLean, VA, 1999, p.481-487
- 10Б.** Basov N., Hager G., Ionin A., Kotkov A., Kurnosov A., McCord J., Napartovich A., Turkin N. Efficient first-overtone CO laser frequency tuned within the spectral range of 2.5-4.2 μm // Advanced High Power Lasers, Osaka, Japan, November 01, 1999. Proceedings of SPIE. V.3889, p.17-30 (April 3, 2000)
- 11Б.** Ionin A., Kotkov A., Kurnosov A., Napartovich A., Turkin N. Spectrum formation of pulsed first-overtone CO laser operating on highly excited vibrational transitions//Advanced High Power Lasers, Osaka, Japan, November 01, 1999 Proceedings of SPIE. V.3889, p.235-241 (April 3, 2000)
- 12Б.** Basov N., Hager G., Ionin A., Kotkov A., Kurnosov A., McCord J., Napartovich A., Turkin N. Frequency tunable single-line pulsed first overtone carbon monoxide laser// Advanced High Power Lasers, Osaka, Japan, November 01, 1999 Proceedings of SPIE. V.3889, p.482-493 (April 3, 2000)
- 13Б.** Ionin A.A., Klimachev Yu.M., Konev Yu.B., Kotkov A.A., Kurnosov A.K., Napartovich A.P., Seleznev L.V., Sinitsyn D.V., Terekhov Yu.V. Multiquantum vibrational exchange in vibration excited CO molecules // XIII International Symposium on Gas Flow and Chemical Lasers and High-Power Laser Conference, Florence, Italy, 2000. Proceedings of SPIE. V.4184, p.234-237 (January 25, 2001)
- 14Б.** Ionin A., Kotkov A., Klimachev Yu., Seleznev L., Sinitsyn D., Kurnosov A., Napartovich A., Snyrev S., Hager G., McCord J. Single-line pulsed first-overtone CO laser: small-signal gain and spectrum formation // Proceedings of International Conference LASERS 2000, 4 8 Dec 2000, Albuquerque, NM, USA, STS Press, McLean, VA, USA (2001), p.309
- 15Б.** Cacciatore M., Kurnosov A., Napartovich A. Calculations of state-to-state rate constants for vibration-vibration exchange between CO($v>30$) and N₂($v=0$) molecules // Proceedings of International Conference ICPEAC 2001, 18-24 July 2001, (Santa Fe, New Mexico, USA, 2001), p.596
- 16Б.** Konev Yu.B., Ionin A.A., Kochetov I.V., Kurnosov A.K., Napartovich A.P. Physics of laser action using high vibrational excitation of CO molecule // High-Power Laser Ablation IV, April 22, Taos, NM, USA, 2002, C.R. Phipps ed. Proceedings of SPIE. V.4760, p.935-941 (September 9, 2002)
- 17Б.** Andrei A. Ionin; Andrei A. Kotkov; Yurii M. Klimachev; Leonid V. Seleznev; Dmitrii V. Sinitsyn; Alexander K. Kurnosov; Anatoly P. Napartovich; Sergei Shnyrev; Gordon D. Hager; John E. McCord. Small-signal gain and kinetic processes on highly excited vibrational levels in active medium of pulsed first-overtone CO laser// High-Power Laser Ablation IV, Taos, NM USA, April 22, 2002. Proceedings of SPIE. V.4760. p.1047-1054 (September 9, 2002)
- 18Б.** Ionin A., Klimachev Yu., Kotkov A., Sinitsyn D., Seleznev L., Vetoshkin S., Kozlov A., Rulev O., Napartovich A., Kurnosov A., Shnyrev S. Small signal gain time behavior on high vibrational transitions ($V>15$) of pulsed CO laser amplifier // XI Conference on Laser Optics, 30 June-4 July 2003, St. Petersburg, Russia. Proceedings of SPIE. V.5479, p. 156–162 (2004)
- 19Б.** Kurnosov A., Napartovich A. and Cacciatore M. VV-Energy exchanges in N₂-

N_2 and N_2 -CO collisions: dynamics and kinetics modelling of strongly excited systems // 17TH European conference on atomic & molecular physics of ionized gases (ESCAMPIG 17, 1-5 September 2004). Conference proceedings, p. 55-56

20Б. Napartovich A.P., Kurnosov A.K., Shnyrev S.L., Ionin A.A., Klimachev Yu.M., Kotkov A.A., Seleznev L.V., Sinitsyn D.V. CO laser: Advances in theory and experiment // XV International Symposium on Gas Flow and Chemical Lasers & High Power Lasers Conference, 30 August – 3 September 2004, Prague, Czech Republic; Prague. Proceedings of SPIE. V.5777, p.408-413 (April 01, 2005)

21Б. Kurnosov A.K., Napartovich A.P., Snyrev S.L., Cacciatore M. Vibrational energy exchange in nitrogen: application of new rate constants for kinetic modelling // Proceedings of 18th European Sectional Conference on Atomic and Molecular Physics of Ionized Gases “Escampig XVIII”, July 12-16, 2006, Lecce, Italy, Abstracts of invited lectures and contributed papers, p.71-72

22Б. Cacciatore M., Kurnosov A., Napartovich A. VV state-to-state rate constants in N_2 - N_2 and N_2 -CO collisions in a wide temperature range// 63th Gaseous Electronics Conference and 7th International Conference on Reactive Plasmas (GEC 2010), Paris, France, 2010. Advance program, paper KWP.00125