

УДК 537.50

НОВЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА ЭФФЕКТИВНОСТИ ВОЗБУЖДЕНИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ УРОВНЕЙ МОЛЕКУЛ В ГАЗОВЫХ СМЕСЯХ

Р. В. ЧИФЛИКЯН

Ереванский государственный университет

(Поступила в редакцию 22 апреля 1997г.)

Данный подход основан на прямом использовании зависимостей дрейфовых скоростей электронов, приведенных напряженностей электрических полей и долей вкладываемых мощностей разряда в колебательные уровни молекул в функции от средней энергии электронов в чистых однокомпонентных газах, составляющих данную смесь. Данный метод справедлив для средних энергий электронов в области 1—2 эВ и имеет точность 5—10%.

1. Выходная мощность и эффективность газовых лазеров, лазерных усилителей и т. п. определяются, в частности долей энергии электрического поля, поступающей в колебательные степени молекул CO_2 , CO и N_2 [1]. Баланс энергии электронов в газовых смесях в электрическом разряде традиционно определяется численным решением уравнения Больцмана для функции распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ) [2]. Однако, численные методы, наряду со своими неоспоримыми преимуществами, обладают также рядом недостатков. Так, например, результаты, полученные для смеси одного состава, не могут непосредственно быть использованы для других; оптимизация смесей по тем или иным характеристикам представляет сложную вычислительную задачу; необходима полная информация о сечениях упругих и неупругих электрон-молекулярных соударений, что не всегда хорошо известно и т. д.

В данной работе предлагается простое приближенно-аналитическое соотношение, напрямую связывающее между собой доли энергии электрического поля, идущей в колебательные степени молекул в произвольной газовой смеси и составляющих ее чистых газов. В основе данной формулы лежит подход, разработанный в [3], где дрейфовые скорости электронов и приведенные напряженности электрических полей в чистых газах и их произвольных смесях непосредственно связаны друг с другом. Этот подход основан на слабой чувствительности связи между кинетическими коэффициентами электронов и параметрами элементарных процессов электрон-молекулярных соударений к виду ФРЭЭ. В качестве единственного параметра, характеризующего константы скоростей всех элементарных процессов, которые определяют баланс энергии электронов в газовых смесях, принимается средняя энергия электронов. Диапазон изменения средних энергий электронов (1—3 эВ) выбирается таким, что процессы возбуждения электронных состояний молекул, а также их диссоциация и ионизация не

дают заметного вклада в баланс энергии электронов. При этом отпадает необходимость в численном решении кинетического уравнения. Подробное обоснование данного подхода приводится в [4].

2. Согласно [3], дрейфовые скорости электронов и приведенные напряженности электрических полей в произвольных газовых смесях однозначно связаны следующим соотношением:

$$\sum_{j=1}^N p_j e_j w_j^{\pm 1} = 1, \quad (1)$$

где p_j — парциальное давление j -ого компонента, $e_j = \bar{E}_j(U)/\bar{E}(U)$, где $\bar{E}_j(U)$ и $\bar{E}(U)$ — приведенные напряженности электрических полей в газе j -ого сорта и смеси, соответственно; $w_j = W_j(U)/W(U)$, где $W_j(U)$ и $W(U)$ — дрейфовые скорости электронов в газе j -ого сорта и смеси, соответственно; N — число компонентов в данной смеси; U — средняя энергия электронов.

Как следует из (1),

$$\bar{E}W = \sum_{j=1}^N p_j \bar{E}_j W_j. \quad (2)$$

Данное соотношение означает, что полная мощность разряда, вкладываемая в электронный газ, равна сумме парциальных мощностей в соответствующих чистых газах, составляющих данную смесь. Отметим, что значения $\bar{E}_j$, W_j , $\bar{E}$ и W берутся при одном и том же значении средней энергии электронов U .

Как известно, эффективность возбуждения колебательных уровней молекул определяется вкладываемой в них долей мощности разряда $\delta_j = \delta_j(U)$ [2]. Следовательно, мощность разряда, вкладываемая в возбуждение колебательных уровней молекул j -ого сорта, равна $p_j \bar{E}_j W_j \delta_j$. Тогда искомый относительный вклад этого канала диссипации энергии будет определяться долей вкладываемой энергии $\delta_j^* = \delta_j^*(U)$, определяемой как

$$\delta_j^*(U) = \frac{p_j \bar{E}_j W_j}{\bar{E}W} \delta_j. \quad (3)$$

3. Точность формулы (3) проверялась нами для смеси $CO:CO_2 = 1:1$ [2]. Зависимости $\bar{E}_1 = \bar{E}_1(U)$, $W_1 = W_1(U)$ и $\delta_1 = \delta_1(U)$ для CO брались из [5]; для CO_2 зависимости $\bar{E}_2 = \bar{E}_2(U)$ и $W_2 = W_2(U)$ брались из [2, 6], а $\delta_2 = \delta_2(U)$ — из [7]. Результаты сравнений приводятся в Таблице.

На рисунке для различных составов газовых смесей $CO_2:N_2:He$ (1:2:3, 4:1:12, 1:7:30 и 1:7:0) приводятся зависимости долей мощности разряда $\delta^* = \delta^*(U)$, идущих на возбуждение антисимметрической моды CO_2 и колебательной моды N_2 . Сплошные кривые рассчитаны по (3), а штриховые — получены численным счетом в [8]. В расчетах по (3) нами использовались результаты численных расчетов, взятых из следующих работ: зависимости $\bar{E}_1 = \bar{E}_1(U)$ и $W_1 = W_1(U)$

для CO_2 брались из [2, 6, 9], $\delta_1 = \delta_1(U)$ — из [7]; зависимости $\tilde{E}_2 = \tilde{E}_2(U)$, $W_2 = W_2(U)$ и $\delta_2 = \delta_2(U)$ для N_2 брались из [10]; зависимости $\tilde{E}_3 = \tilde{E}_3(U)$ и $W_3 = W_3(U)$ для He — из [11].

ТАБЛИЦА. Расчетные значения доли мощности разряда, идущей на возбуждение колебательных мод CO_2 и CO в смеси $\text{CO}:\text{CO}_2 = 1:1$ в зависимости от средней энергии электронов U . ($1\text{Td} \equiv 10^{-17} \text{В} \cdot \text{см}^2$).

	U , эВ	1,10	1,50	2,25	3,00
CO	$\tilde{E}_1$, Тд	68,9	90,3	117	150
	W_1 , 10^5см/с	76,1	105	143	177
	δ_1 , %	86,0	71,9	50,0	34,2
CO_2	$\tilde{E}_2$, Тд	30,0	36,8	56,0	77,4
	W_2 , 10^5см/с	84,2	94,2	122	143
	δ_2 , %	60,5	48,2	30,9	19,1
Смесь, ф-ла (3)	δ_1^* , %	58,0	52,7	35,5	24,1
	δ_2^* , %	19,7	12,9	8,96	5,61
	$\delta_1^* + \delta_2^*$, %	77,7	65,6	44,5	29,8
Смесь, числен- ный расчет [2]	δ_1^* , %	60,0	50,0	32,7	25,5
	δ_2^* , %	18,6	13,6	7,73	6,36
	$\delta_1^* + \delta_2^*$, %	78,6	63,6	40,4	31,9

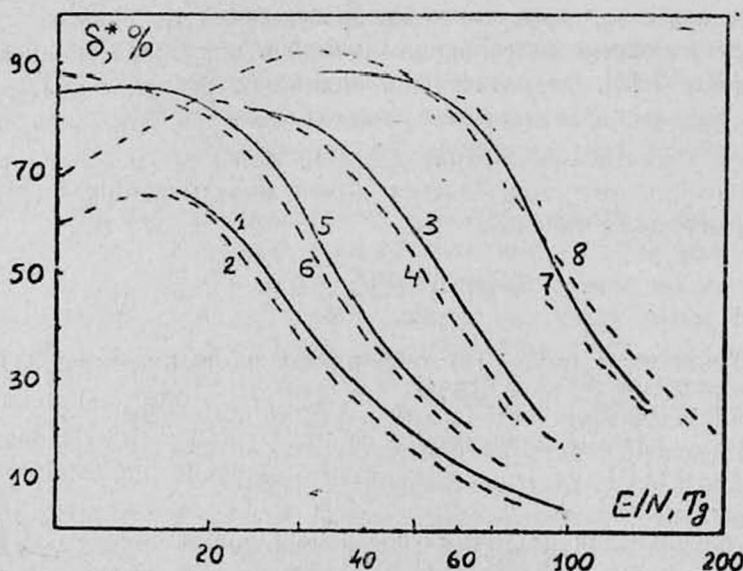


Рис. 1. Расчетные значения доли мощности разряда, идущей на возбуждение антисимметричной моды CO_2 и колебательной моды N_2 , в зависимости от E/N для различных составов лазерной смеси $\text{CO}_2:\text{N}_2:\text{He}$. 1—4:1:12—по (3), 2—4:1:12—из [8]; 3—1:2:3—по (3), 4—1:2:3—из [8]; 5—1:7:30—по (3), 6—1:7:30—из [8]; 7—1:7:0—по (3), 8—1:7:0—из [8]. ($1\text{Td} \equiv 10^{-17} \text{В} \cdot \text{см}^2$).

Как видно из вышеприведенных примеров, погрешность формулы (3) не превышает 5—10%, что позволяет использовать ее для оперативных расчетов эффективностей возбуждения колебательных уровней молекул CO , CO_2 , N_2 в произвольных многокомпонентных газовых смесях. Для этого необходимо иметь достаточно полный банк данных по зависимостям дрейфовых скоростей электронов, приведенных напряженностей электрических полей и эффективностей возбуждения колебательных уровней молекул от средней энергии электронов в чистых однокомпонентных газах, составляющих данную смесь. Использование формулы (3) требует гораздо меньших затрат машинного времени по сравнению с подходом, основанным на численном решении уравнения Больцмана, особенно в смесях, где $N \gg 1$.

ЛИТЕРАТУРА

1. У. Т. Лиланд. В кн.: Газовые лазеры. Под ред. И. Мак-Даниеля и У. Нигэна, М., Мир, 1986.
2. W. L. Nighan. Phys. Rev. A2, 1989 (1970).
3. R. V. Chiflikian. Phys. Plasmas, 2, 3902 (1995).
4. А. В. Елецкий. Физика плазмы, 3, 657 (1977).
5. Н. Л. Александров, А. М. Кончаков, Э. Е. Сои. ЖТФ, 49, 1194 (1979).
6. J. W. Gelagher, E. C. Beaty, J. Dutton, L. C. Pitchford. J. Phys. Chem. Ref. Data, 12, 109 (1983).
7. А. Н. Лобанов, Я. Ф. Сучков. Квант. электр., 1, 1527 (1974).
8. J. J. Lowke, A. V. Phelps, B. W. Irwin. J. Appl. Phys., 44, 4664 (1973).
9. В. А. Пивовар, Т. Д. Сидорова. ЖТФ, 49, 1425 (1979).
10. Н. Л. Александров, А. М. Кончаков, Э. Е. Сои. Физика плазмы, 4, 169 (1978).
11. A. J. Davies, J. Dutton, G. J. Evans, et al. J. Phys. D: Appl. Phys., 17, 287 (1984).

A NEW METHOD FOR CALCULATION OF EXCITATION EFFICIENCY OF VIBRATIONAL LEVELS OF MOLECULES IN GAS MIXTURES

R. V. CHIFLIKIAN

This approach is based on the direct use of dependences of drift velocities of electrons, reduced electric fields, and fractions of discharge energy delivered to vibrational states of molecules as a function of the mean electron energy in single gases composing a given mixture.

ԳԱԶԱՅԻՆ ԽԱՌՆՈՒՐԴՆԵՐՈՒՄ ՄՈԼԵԿՈՒԼՆԵՐԻ ՏԱՏԱՆՈՂԱԿԱՆ ՄԱԿԱՐԴԱԿՆԵՐԻ ԳՐԳՈՄԱՆ ԱՐԴՅՈՒՆԱՎԵՏՈՒԹՅԱՆ ՀԱՇՎԱՐԿԻ ՆՈՐ ՄԵԹՈԴ

Ռ. Վ. ՉԻԼԻԿԻԱՆ

Տղլալ մոտեցումը հիմնված է մոլեկուլների տատանողական մակարդակների մեջ էլեկտրոնների տեղաշարժի արագությունների, էլեկտրական դաշտերի լարվածությունների և պարպումի հզորությունների ներդրվող մասի կախումների ուղղակի ոգտագործման վրա: