

348P
徐俊
严海星
高智

860714
长春化物所
北京力学所
中科院力学所

改文
860715
860715
860820

连续波扩散型氧-碘传能化学激光器模型

冯浩 庄琦

(中国科学院化学物理研究所)

提要: 采用二维理论模型研究连续波扩散型氧-碘化学激光器的性能。假设主、副气流间在侧向压力不变的情况下进行混合和反应, 采用有限差分技术来求解偏微分方程组, 考察了比功率沿气流方向的变化以及 $O_2(^1\Delta)$ 浓度对比功率的影响。

Two-dimensional theoretical model for diffusional CW oxygen-iodine chemical lasers

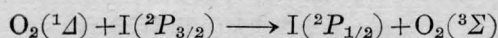
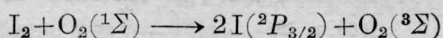
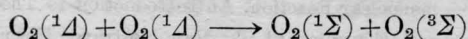
Feng Hao, Zhuang Qi

(Dalian Institute of Chemical Physics, Academia Sinica, Dalian)

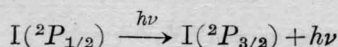
Abstract: A two-dimensional theoretical model for predicting the diffusional CW oxygen-iodine laser performances is presented. The parallel mixing at constant lateral pressure between a pair of primary and secondary streams is assumed. A set of parabolic partial differential equations are solved using the finite-difference techniques. The change of specific power with flow direction and the effect of the concentration of $O_2(^1\Delta)$ on specific power are studied.

一、前言

氧-碘传能化学激光器^[1,2]是利用反应



获得激发态的 $I(^2P_{1/2})$, 并使之受激发射:



得到 $1.315 \mu m$ 的激光输出, 一般让主、副两

股气流分别注入 $O_2(^1\Delta)$ 加 $O_2(^3\Sigma)$ 和 I_2 加 Ar 的方法(图1)来达到目的。但有关连续波氧-碘激光的模型研究却不多, 且是简化模型。本文采用二维混合模型对上述激光器进行了理论计算。

二、基本化学动力学过程及数学模型

本模型考虑了如下化学动力学过程:

收稿日期: 1986年7月14日。

化学动力学过程	反应速率系数 k_i ($\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$) s^{-1}	来源
$\text{I} + \text{O}_2^* \longrightarrow \text{I}^* + \text{O}_2$	$k_1 = 4.6 \times 10^{18}$	[4]
$\text{I}^* + \text{O}_2 \longrightarrow \text{I} + \text{O}_2^*$	$k_2 = 6.2 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{396}{T}\right)$	[4]
$\text{I}^* + \text{O}_2^* \longrightarrow \text{I} + \text{O}_2^{**}$	$k_3 = 2.3 \times 10^{11} \exp\left(-\frac{390}{T}\right)$	[4]
$2\text{O}_2^* \longrightarrow \text{O}_2^{**} + \text{O}_2$	$k_4 = 4.2 \times 10^7 \exp\left(-\frac{390}{T}\right)$	[4]
$\text{O}_2^{**} + \text{I}_2 \longrightarrow \text{O}_2 + 2\text{I}$	$k_5 = 5.7 \times 10^{13} \exp\left(\frac{265}{T}\right)$	[4]
$\text{I}^* + \text{O}_2 \longrightarrow \text{I} + \text{O}_2^*$	$k_6 = 1.1 \times 10^7 \exp\left(\frac{1650}{T}\right)$	[4]
$\text{I}^* + \text{I}_2 \longrightarrow \text{I} + \text{I}_2$	$k_7 = 7.8 \times 10^9 \exp\left(\frac{1650}{T}\right)$	[4]
$\text{I}^* + \text{He} \longrightarrow \text{I} + \text{He}$	$k_8 = 1.2 \times 10^4 \exp\left(\frac{1650}{T}\right)$	[4]
$\text{O}_2^* + \text{O}_2 \longrightarrow \text{O}_2 + \text{O}_2^*$	$k_9 = 4.2 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{5300}{T}\right)$	[3]
$\text{O}_2^* + \text{I} \longrightarrow \text{O}_2 + \text{I}$	$k_{10} = 4.6 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{2600}{T}\right)$	[4]
$\text{O}_2^* + \text{He} \longrightarrow \text{O}_2 + \text{He}$	$k_{11} = 6.0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{7000}{T}\right)$	[4]
$\text{O}_2^{**} + \text{O}_2 \longrightarrow \text{O}_2 + \text{O}_2^*$	$k_{12} = 4.2 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{4300}{T}\right)$	[5]
$\text{O}_2^{**} + \text{He} \longrightarrow \text{O}_2^* + \text{He}$	$k_{13} = 6.3 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{4900}{T}\right)$	[4]
$\text{O}_2^{**} + \text{I}_2 \longrightarrow \text{O}_2 + \text{I}_2$	$k_{14} = 5.7 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{780}{T}\right)$	[4]
$2\text{I} + \text{O}_2 \longrightarrow \text{I}_2 + \text{O}_2$	$k_{15} = 7.3 \times 10^{13} \exp\left(\frac{1600}{T}\right)$	[3]
$2\text{I} + \text{I}_2 \longrightarrow \text{I}_2 + \text{I}_2$	$k_{16} = 4.0 \times 10^{32} T^{-5.9}$	[4]
$2\text{I} + \text{He} \longrightarrow \text{I}_2 + \text{He}$	$k_{17} = 3 \times 10^{19} T^{-1.7}$	[4]
自发辐射和受激辐射:		
$\text{I}^* \xrightarrow{A_{21}} \text{I} + h\nu$	$A_{21} = 6.0 \text{ s}^{-1}$	[4]

在建立数学模型时,采用如下基本假设:

1. 光学谐振腔(简称光腔)内气流为二维层流;
2. 气体流动过程中,激射方向无压力梯度;
3. 气流为完全气体;
4. 只考虑 $\text{I}(^2P_{1/2})$ 的能级跃迁。气流流动方向为 x 坐标, 激射方向为 y

坐标。控制方程为:

$$\frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} = 0 \quad (1)$$

$$\rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) \quad (2)$$

O_2^* 代表 $\text{O}_2(^1\Delta)$, O_2^{**} 代表 $\text{O}_2(^1\Sigma)$, O_2 代表 $\text{O}_2(^3\Sigma)$, I^* 代表 $\text{I}(^2P_{1/2})$, I 代表 $\text{I}(^2P_{3/2})$, I_2 代表 $\text{I}_2(^1\Sigma)$ 。

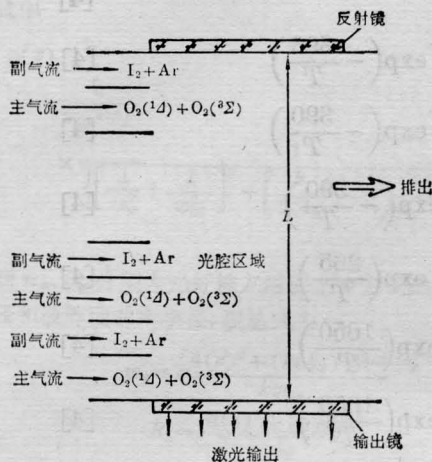


图1 连续波氧-碘化学激光装置简图

$$\rho u \frac{\partial C_{I^*}}{\partial x} + \rho v \frac{\partial C_{I^*}}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{L_e}{P_r} \cdot \frac{\partial C_{I^*}}{\partial y} \right) + \dot{W}_{I^*} - \frac{\alpha I}{\varepsilon} \quad (3.1)$$

$$\rho u \frac{\partial C_I}{\partial x} + \rho v \frac{\partial C_I}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{L_e}{P_r} \cdot \frac{\partial C_I}{\partial y} \right) + \dot{W}_I + \frac{\alpha I}{\varepsilon} \quad (3.2)$$

$$\rho u \frac{\partial C_i}{\partial x} + \rho v \frac{\partial C_i}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{L_e}{P_r} \cdot \frac{\partial C_i}{\partial y} \right) + \dot{W}_i \quad (3.3)$$

(其中 $i=3, 4, 5, 6, 7$)

$$\begin{aligned} \rho v C_p \frac{\partial T}{\partial x} + \rho v C_p \frac{\partial T}{\partial y} &= u \frac{dP}{dx} - \sum_{j=1}^7 h_j \dot{W}_j + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\mu}{P_r} C_p \frac{\partial T}{\partial y} \right) \\ &+ \mu \left[\left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + \frac{L_e}{P_r} \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right) \right] \\ &\times \sum_{j=1}^7 C_{p,j} \frac{\partial C_j}{\partial y} \\ &- (h_1 - h_{I^*} + \varepsilon) \frac{\alpha I}{\varepsilon} \end{aligned} \quad (4)$$

$$P = \rho R T \sum_{j=1}^7 C_j = \frac{\rho R T}{M} \quad (5)$$

$$C_p = \sum_{j=1}^7 C_{p,j}(T) C_j \quad (6)$$

$$\alpha = \frac{\lambda^2 A_{21}}{4\pi \Delta \nu_D} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \cdot V(b) \cdot \rho N_0 \left(C_{I^*} - \frac{C_I}{2} \right) \quad (7)$$

其中 $b = \frac{\Delta \nu_L}{\Delta \nu_D} \sqrt{\ln 2}$

$$V(b) = \exp(b^2) \cdot [1 - \operatorname{erf}(b)]$$

$$\mu = (1.44 \times 10^{-5} T^{3/2}) / (T + 111) \quad (8)$$

采用反射率分别为 r_1, r_2 平面镜光腔结构, 不考虑镜子的吸收和窗口的存在, 阈值增益为:

$$\alpha_{th} = -\frac{\ln r_1 r_2}{2L} \quad (9)$$

选择主、副气流中心区域 ($d_1 + d_2$) 内为计算基元(图2)。根据初始边界条件:

$$x=0: u=u(y), T=T(y), C_j=C_j(y) \quad (10)$$

$$y=0 \text{ 或 } y=d_1+d_2:$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{\partial C_i}{\partial y} = 0 \quad (11)$$

和预先指定的光腔入口压力 P_e , 利用有限差分技术, 在计算机上对方程 (1)~(9) 求其数值解, 获得 x 处的增益 α 和光强 I 的数值。激光输出的总功率 W 和比功率 σ 为:

$$W = \int_{x_{in}}^{x_o} 2n\alpha I (d_1 + d_2) Z_M dx \quad (12)$$

$$\sigma = \int_{x_{in}}^{x_o} \alpha I (d_1 + d_2) Z_M dx / q \quad (13)$$

式中, n ——主、副“气流对”数, 即总计算基元数为 $2n$; Z_M ——光腔高度, 计算时选 Z_M 为 1cm; q ——计算基元流量。

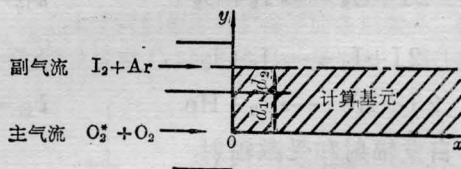


图2 计算基元选择

三、计算结果及讨论

计算时选择如下参数: 计算基元尺寸: $d_1=0.25$ cm, $d_2=0.02$ cm; 光腔阈值增益: $\alpha_{th}=0.1253 \times 10^{-3}$ cm⁻¹; 气流初始边界条

注: i (或 j)=1 代表 I, i (或 j)=2 代表 I*, i (或 j)=3, 4, 5, 6, 7 分别代表 O₂^{*}, O₂^{*}, O₂, I₂, Ar 组分。

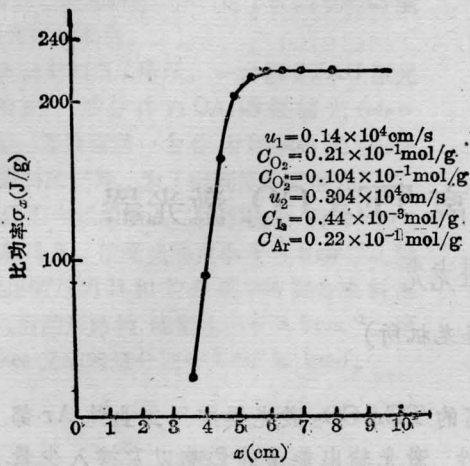


图3 比功率沿气流方向的变化

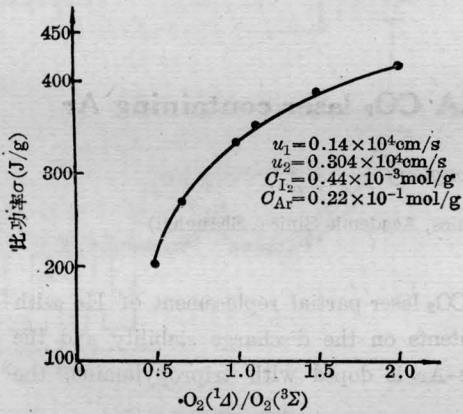


图4 $O_2(^1D)$ 和 $O_2(^3\Sigma)$ 之比对比功率的影响

件: $T_1 = T_2 = 300 \text{ K}$, $P_e = 1 \text{ Torr}$, 速度、浓度见图 3、4。其它光谱学参数、热力学参数略。

1. 基元比功率 σ_e 沿气流方向的变化

主、副气流进入光腔区域后开始反应。当 x 沿气流方向由零增长时, 初期 $\alpha < \alpha_{th}$, 无激光输出; 当 $\alpha = \alpha_{th}$ 时, $x = x_{th}$, 开始有激光输出, 沿气流方向的输出功率 W 不断增加。当再次出现 $\alpha < \alpha_{th}$ 时, $x = x_e$, 激光输出终止, 并获得最大激光输出功率。图 3 考察了比功率 σ_e 沿 x 方向的变化, 且得到整个体系激光输出的最大比功率 σ 。

2. $O_2(^1D)$ 对比功率 σ 的影响

由化学反应模型可见, $O_2(^1D)$ 增加时, 获得激发态的 $I(^2P_{1/2})$ 粒子数增多, 从而使激光输出功率和比功率大大增加。由图 4 可

见, 改变 $O_2(^1D)/O_2(^3\Sigma)$ 对比功率具有强烈的影响。

对张存浩教授的支持和指导, 表示谢意。

参 考 文 献

- [1] R. F. Heidner III *et al.*; *J. Phys. Chem.*, 1983, **87**, 2348.
- [2] J. Bachar, S. Rosenwaks; *Chem. Phys. Lett.*, 1983, **96**, 526.
- [3] Л. Г. Виноградова и др.; *Квант. электр.*, 1982, **9**, №6, 1193.
- [4] G. E. Busel; *IEEE J. Quant. Electr.*, 1981, **QE-17**, 1128.

附录: 公式符号说明

- u, v : x, y 方向分速
- ρ : 密度
- P : 压力
- μ : 粘性系数
- C_i : 克分子-质量比浓度
- C_{I_1} : $I(^2P_{1/2})$ 克分子-质量比浓度
- C_{I_2} : $I(^2P_{3/2})$ 克分子-质量比浓度
- W_i 或 \dot{W}_j : 化学反应 i 或 j 组分的生成速率
- \dot{W}_{I_1} : $I(^2P_{1/2})$ 化学反应生成速率
- \dot{W}_{I_2} : $I(^2P_{3/2})$ 化学反应生成速率
- L_e : Lewis 数, 在此取为 1
- P_r : Prandtl 数, 在此取为 1
- α : 增益系数
- α_{th} : 阈值增益系数
- I : 光强
- ϵ : 每摩尔光子能量
- C_P, C_{P_1} : 比热
- h_j, h_I, h_{I_1} : 热焓
- T : 温度
- R : 通用气体常数
- \bar{M} : 平均分子量
- λ : 波长
- A_{21} : 自发辐射系数
- $\Delta\nu_D$: Doppler 线宽
- $V(b)$: Voigt 函数
- b : Doppler 线宽和 Lorentz 线宽比
- N : 化学反应级数
- N_A : Avogadro 数
- $\text{erf}(b)$: 误差函数
- W, σ : 总功率和比功率