

# 电引发脉冲氧碘化学激光器的增益

陈丽吟

(中国科学院力学研究所, 北京 100080)

**提要** 本文对脉冲氧碘化学激光器的增益性能进行了理论估算。碘原子由  $\text{CH}_3\text{I}$  电离产生。研究了各种压力条件下成份比和  $\text{CH}_3\text{I}$  离解度对增益系数的影响。

**关键词** 化学激光, 电引发, 化学非平衡,  $\text{CH}_3\text{I}$

## Gain characteristics of a pulsed oxygen-iodine chemical laser initiated by electrical discharge

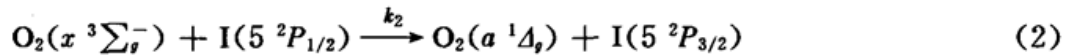
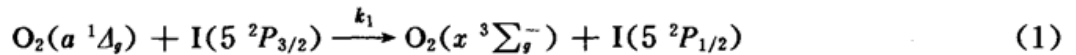
Chen Lizhin

(Institute of Mechanics, Academia Sinica, Beijing 100080)

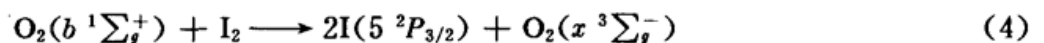
**Abstract** The gain characteristics of a pulsed oxygen-iodine chemical laser has been studied theoretically. The necessary iodine atom is initiated by electrolytic dissociation of  $\text{CH}_3\text{I}$  from low energy electrons. The influences of pressure, composition and the dissociation degree of  $\text{CH}_3\text{I}$  on gain are investigated in detail.

**Key words** chemical laser, electrical discharge, chemical non-equilibrium,  $\text{CH}_3\text{I}$

氧碘化学激光器因波长短(1.315  $\mu\text{m}$ ),高比功率、高效率、易放大、无毒、价廉等优点而深受重视。近年来又鉴于它应用于热核聚变的可能前景,促进了大能量周期运转的脉冲氧碘化学激光器迅速发展<sup>[1]</sup>。它的核心反应是

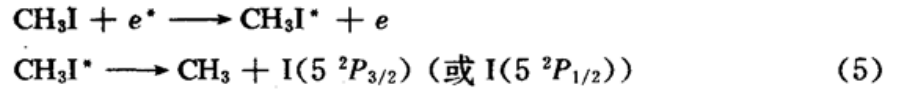


反应(1)、(2)互为正反过程,速率系数都很大,  $T = 300\text{K}$ ,  $k_1 = 7.7 \times 10^{-11} \text{cm}^3/(\text{s} \cdot \text{molecule})$ ,  $k_2 = 2.6 \times 10^{11} \text{cm}^3/(\text{s} \cdot \text{molecule})$ ,  $\nu = 7605 \text{cm}^{-1}$ ,  $h$  是 Planck 常数。(1)~(3)反复循环,把  $\text{O}_2(a^1\Delta_g)$  能量源源不断传给  $\text{I}(5^2P_{1/2})$ ,继而转化为辐射能。碘原子的来源是多途径的,一般连续氧碘激光器用碘分子直接引发。在传输过程中  $\text{O}_2(a^1\Delta_g)$  自猝灭反应产生了  $\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+)$ ,而



$\text{I}_2$  是  $\text{I}(5^2P_{1/2})$  和  $\text{O}_2(b^1\Sigma_g^+)$  的高效猝灭剂,所以  $\text{I}_2$  的浓度不能高,一般报道  $[\text{O}_2(a^1\Delta_g)]/[\text{I}_2]$

$\approx 30 \sim 50^{[1]}$ , 从而决定了氧碘激光器的低增益。脉冲运转的氧碘激光器有许多是用光解碘的卤化物得到碘原子的。最近《中国激光》杂志报道了放电引发的  $O_2(a^1\Delta_g) - CH_3I - N_2$  体系氧碘化学激光器<sup>[2]</sup>, 用低能电子使  $CH_3I$  离解成  $I(5^2P_{3/2})$  和  $I(5^2P_{1/2})$ , 即



代替方程(4)。这过程不用碘分子, 避免了  $I_2$  对  $I(5^2P_{1/2})$  的快速碰撞消激发作用。据报道<sup>[2]</sup> 电引发效率比光解法高出 350 倍, 并测出了激光能量和脉冲宽度。

本文在较宽范围的运转条件下从理论上估算这种类型激光器的增益, 以此摸索它的潜力和影响增益系数的因素, 寻找可用的规律性结果\*。

由化学发生器产生的  $O_2^+$  和  $O_2$  混合气流(忽略水含量)与  $N_2$  和  $RI$  气流在混合室均匀混合后注入光腔。对光腔进行脉冲放电使  $RI$  离解为  $R, I$  和  $I^*$ 。由于反应(1)~(3)快速进行, 腔中因受激发射输出  $\lambda = 1.315 \mu m$  碘激光。假定激活介质混合物在出光之前已形成(因放电时间很短  $\ll 10^{-7} s$ )。由于化学反应、碰撞弛豫和原子复合、离解诸动力学过程的发展, 光腔共有十种组元:  $O_2^+, O_2, O_2^+, I^*, I, I_2, RI, R, R_2$  和  $N_2$ <sup>[4]</sup>。

$I^*$  和  $I$  浓度的大小取决于  $RI$  的电离程度, 碘分子初浓度  $[I_2]_0 = 0$ , 光腔内部  $[I_2]$  来源于碘原子  $I$  的再度复合过程(相对较慢), 而激活介质混合物中  $I$  的浓度又小, 所以  $[I_2]$  也很小。因目前还缺少电子对  $RI$  电离的电子能量分布函数和电离速率系数对  $E/N$  的关系数据, 无法直接从给定初始条件估算电离度。为使运算顺利进行, 事先假定一序列电离度:  $DIA = ([I] + [I^*])/[RI]$ , 只要给定  $[I^*]/[I], [I^*]/[O_2^+]$  可以推出。

计算初始条件为:  $T_0 = 293 K$ , 气流速度  $u = 30 m/s$ ; 放电时间  $< 0.1 \mu s$ ; 进入光腔的初始成份:  $[O_2^+]: [O_2]: [RI]: [N_2] = 1: 1: 2: 6$ ;  $DIA$  从  $0.0025 \sim 0.02$ ;  $[I^*]/[I]$  从  $0 \rightarrow \infty$ , 压力从  $0.133 \sim 13.3 kPa$ 。

### 基本方程

#### (1) 粒子数方程组

$$\frac{dN_i}{dt} = \left( \frac{dN_i}{dt} \right)_{\text{生成组元 } i} - \left( \frac{dN_i}{dt} \right)_{\text{组元 } i \text{ 消失}} + N_T \frac{\delta q I_A}{h\nu} + \delta A_{21} N_1^*(I) \quad i = 1, 2, \dots, 9 \quad (I)$$

因为  $N_2$  为惰性气体, 不参与化学反应, 无粒子数变化。当组元  $i$  为  $I^*$ ,  $\delta = -1$ ;  $i$  为  $I$ ,  $\delta = +1$ ; 其他组元,  $\delta = 0$ 。

#### (2) 流动守恒方程组

$$\frac{dT}{dt} = \frac{N_0}{N_T (\sum_i \psi_i C_{p,i})} \left\{ \frac{WE}{HW} + \sum_i \left[ \left( \frac{h_i - C_{p,i} T}{N_0} \right) \frac{dN_i}{dt} \right] - \frac{g I_A}{HW} \times 10^{-7} - mu \left( \frac{du}{dt} \right) \times 10^{-7} / HW \right\} \quad (I-1)$$

$$\frac{du}{dt} = \left[ \left( \frac{R}{M} \right) \cdot u \cdot \frac{dT}{dt} \right] / [(R/M) \cdot T - u^2] \quad (I-2)$$

$$\frac{d\rho}{dt} = - \frac{\rho \cdot (R/M) \cdot (dT/dt)}{(R/M) \cdot T - u^2} \quad (I-3)$$

$$P = N_T k T \quad (I-4)$$

$$N_T = \sum_i^{10} N_i \quad (I-5)$$

\* 下文令:  $CH_3I, I(5^2P_{3/2}), I(5^2P_{1/2})$  用  $RI, I, I^*$  代替;  $O_2(x^3\Sigma_g^-), O_2(a^1\Delta_g), O_2(b^1\Sigma_g^+)$  用  $O_2, O_2^+, O_2^*$  代替。

I 式中,  $\psi_i, C_i, h_i, N_i$  分别代表第  $i$  种组元的分子分数、定压热容量、生成热和单位体积分子数。 $M, g, I_A$  是混合物分子量、增益和光强。 $m$  是单位体积分子质量,  $N_0, R, A_{21}$  是阿佛加德罗数、气体常数和从  $I^*$  到  $I$  的自发辐射系数。 $WE$  是放电功率,  $HW = 4.1868$ , 为热功当量。本文不考虑激光输出,  $I_A = 0$ 。 $N_T$  为单位体积分子总数, 这里  $i = 1, 2, \dots, 10$ 。 $i = 10$ , 代表  $N_2$  组元。

将方程组 I 和 II 耦合, 用 Runge Kutta 法在计算机上联立求解, 得出各时刻组元浓度  $N_i$ ,  $T, P, u, \rho$ , 和  $N_T$  诸物理量。并将  $N_{I^*}$  和  $N_I$  代入增益公式求解小信号增益。

在谱线中心, 增益系数定义为

$$g = \frac{\lambda^2 A_{21}}{4\pi \Delta\nu_D} (\ln 2/\pi)^{1/2} (N_{I^*} - N_I/2) \cdot V(a) \quad (\text{III} - 1)$$

式中  $\Delta\nu_D$  为 Doppler 全宽度,  $a = \sqrt{\ln 2} (\Delta\nu_C/\Delta\nu_D)$ ,  $\Delta\nu_C$  为碰撞全宽度。

$$V(a) = \exp(a^2) [1 - \text{erf}(a)] \quad (\text{III} - 2)$$

$$\text{erf}(a) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^a \exp(-x^2) dx \quad (\text{III} - 3)$$

$\text{erf}(a)$  为误差函数。由于研究的压力范围较宽, 增益公式中同时考虑 Doppler 和碰撞两种展宽因素。不同压力范围有不同  $a$  值,  $\text{erf}(a)$  对应不同的渐近表达式<sup>[3]</sup>, 在本计算中由程序自动转移。当  $a \leq 0.1$ ,  $V(a) \approx 1.0$ , 为纯 Doppler 展宽, 相当于  $p \approx 2.66$  kPa 条件; 当  $a \geq 4.0$ , 趋于纯碰撞展宽, 相当于  $p \approx 13.3$  kPa。在二者之间兼有两种展宽效应。

## 2 结果和讨论

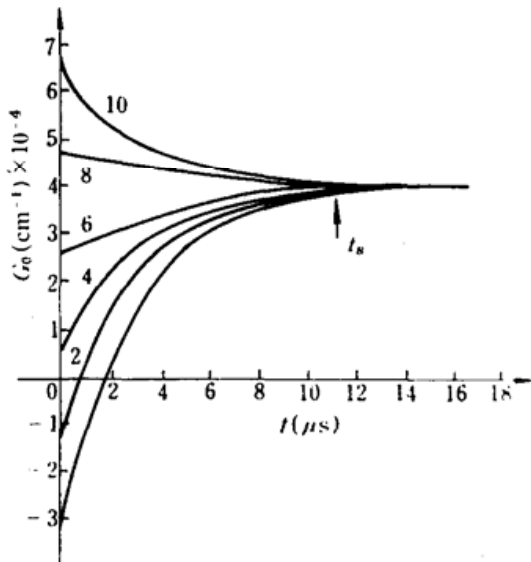
除初始压力  $P_0$  外保持其他物理参数不变, 观察  $t = 20 \mu\text{s}$  时  $T, P, u$  的值(表 1), 从表 1 看出: (1)  $T, P, u$  偏离初值都不很大; (2)  $T, u$  的偏离值随压力增大而加大, 但压力基本不变。这是因为反应(1)和(2)是近共振交换过程, 释放出的热量很少。 $\text{O}_2^*$  和  $I^*$  最有效猝灭剂碘分子浓度又很小, 碰撞弛豫反应释出的热量也相应很小。例如:  $P_0 = 1.33$  kPa,  $[\text{O}_2^*]/[\text{O}_2] = 1$ ,  $[I^* + I]/[\text{O}_2] = 0.011$ ,  $[I^*]/[I] = 1$  条件下, 在一次计算步长时间( $\sim 5 \times 10^{-9}$  s)内,  $du/dt < 10^6$  (cm/s<sup>2</sup>),  $dT/dt < 1 \times 10^5$  (K/s),  $dP/dt \approx -13.3$  kPa/s。相应增量  $\Delta u < 5 \times 10^{-3}$  (cm/s),  $\Delta T < 5 \times 10^{-4}$  K,  $\Delta P < 0.665 \times 10^{-7}$  kPa。所以  $T, P, u$  发展到  $t = 20 \mu\text{s}$  后, 偏离初值仍不大。另外, 随压力增大, 碰撞弛豫过程加快, 反应放出热量相应增加, 所以  $T, P, u$  偏离初值随压力增加略有增加。

Table 1

$P_0$ (kPa)	$u$ (m/s)	$T$ (K)	$P$ (kPa)	$P_0$ (kPa)	$u$ (m/s)	$T$ (K)	$P$ (kPa)
0.133	30.27	295.6	0.133	2.66	32.05	312.6	2.656
0.665	31.02	302.8	0.665	6.65	32.5	317.4	6.64
1.33	31.54	307.7	1.329	13.3	32.8	319.4	13.28

为计算方便起见, 引入  $L$  参量代表  $[I^*]/[I]$  的某一比值, 以考察  $[I^*]/[I]$  对增益系数的影响。结果表明, 对于固定运转条件,  $L$  不同增益的时间历史不同, 见图 1。随时间推移, 对于一定离解度(即  $\text{DIA} = \text{常数}$ ), 不同  $L$  的增益曲线最后都趋于某一定值。从公式(III-1)可知, 当  $[I^*]_0 = [I]/2$ , 增益为零。所以如果初始浓度  $[I^*]_0 \leq [I]/2$  时,  $t = 0$  处增益  $g \leq 0$  (图 1 中  $L = 0, 2$ ); 当  $[I^*]_0 > [I]/2$  时,  $t = 0$  处有正增益(图 1 中  $L = 4, 6$ )。随  $t$  增大,  $g$  逐渐上升, 最后趋于定值。这是因为反应(1)一开始就迅速进行,  $I^*$  原子逐渐增多而  $I$  原子不断消耗,  $g$  随之增大。

但  $I^*$  原子含量加大有利于反应(2)加速进行,最后和反应(1)达成平衡,  $[I^*]$ 和  $[I]$ 就趋于该运转条件下的平衡浓度,  $g$  也趋于定值。反之若  $[I^*] \gg [I]_0$ , 如图 1 中  $L = 8, 10$ 。这时  $[I^*]$  很大, 有利于反应(2)发展, 一开始反应(2)会超过反应(1), 迅速消耗  $I^*$  原子并生成  $I$  原子, 使  $g$  随  $t$  增加而下降, 最后反应(1), (2) 达成平衡,  $[I^*]$ 和  $[I]$ 也达到该运转条件下的平衡浓度, 所以  $t = 0$  时有最大增益。由于一定  $T, P$  条件下  $[I^*]$ 和  $[I]$ 的平衡浓度是固定的, 所以不同  $[I^*]_0/[I]_0$  初始浓度比的所有  $g-t$  曲线最后都汇合在一起。不过压力较小时, 需要较长时间才能达到该定值。设这个汇合时间为  $t_s$ 。从图 2 看出,  $P = 0.133 \text{ kPa}$ ,  $t_s \sim 10 \mu\text{s}$ ;  $P = 1.33 \text{ kPa}$ ,  $t_s \sim 1.5 \mu\text{s}$ ;  $P = 6.65 \text{ kPa}$ ,  $t_s \sim 0.3 \mu\text{s}$ 。高压下的  $t_s$  小于低压的  $t_s$  值。如  $(t_s)_{P=6.65 \text{ kPa}} \ll (t_s)_{P=0.133 \text{ kPa}}$ 。因为提高压力加大了分子间碰撞机会, 反应会更快达到平衡。 $t < t_s$ , 不同  $L$  的  $g-t$  曲线有自己的历史,  $t > t_s$ ,  $L$  或  $[I^*]_0/[I]_0$  的大小对增益没有影响, 因为这时所有  $[I^*]$ 和  $[I]$ 都维持在相同  $T, P$  条件下的平衡浓度、增益都相同。不同  $T, P$  运转条件,  $[I^*]$ 和  $[I]$ 平衡浓度不同, 增益也不同。 $t_s$  在一定程度上也象征反应(1)和反应(2)达到平衡的时间。



$$\frac{([I^*] + [I])}{[O_2^*]} = 0.01$$

$L$	$[I^*]_0$	$[I]_0$	$[I^*]_0/[I]_0$
0	0	0.01	0
2	0.002	0.008	1/4
4	0.004	0.006	2/3
6	0.006	0.004	3/2
8	0.008	0.002	4
10	0.01	0	$\infty$

Fig. 1 Effect of  $L$  on  $g$

$P = 0.133 \text{ kPa}$ ,  $T_0 = 293 \text{ K}$ ,  $u_0 = 30 \text{ m/s}$ ;

$O_2^* : O_2 : (I^* + I) : RI : N_2 = 1 : 1 : 0.01 : 1.99 : 2$

图 2 和图 3 反映了增益对压力的关系。压力较低时, 增益随压力增加而增加。如  $P = 0.133 \text{ kPa}$ ,  $g \approx 2 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ ,  $P = 1.33 \text{ kPa}$ ,  $g \approx 2 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ 。压力继续上升, 增益增加的趋势越来越小, 当  $P \rightarrow 6.65 \text{ kPa}$ , 曲线开始呈饱和状态。 $P = 13.3 \text{ kPa}$ , 增益已有下降趋势。这是因为压力上升, 碰撞消激发起重要作用, 抑制增益进一步提高。一定 DIA 条件下, 用提高压力的办法提高增益有一定限制, 这种限制视运转条件而有所不同。

$([I^*] + [I])$  随 DIA 增加而增加。它在增益介质中的含量是很重要的。图 4 和图 5 说明了增益随离解度增加线性增长的趋势。当压力超过  $1.33 \text{ kPa}$ , 增益超过  $10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ , ( $\text{DIA} > 0.005$ ); 压力超过  $2.66 \text{ kPa}$ ,  $\text{DIA} \geq 0.02$ , 增益可能突破  $10^{-2} \text{ cm}^{-1}$ 。想办法提高 RI 的离解度是至关重要的。图 5 显示了不同时刻增益的 DIA 关系。增益随时间的增加会下降(由于弛豫)。DIA 增加,  $G$  下降更快一些。反映了碘和碘原子对  $I^*$  的快速弛豫作用。

图 6 表明  $[O_2^*]/[O_2]$  比值对增益的影响。 $[O_2^*]/[O_2] < 0.176$ , 增益为负;  $[O_2^*]/[O_2]$  从  $\sim 0.2$  提高到 1, 增益线性上升;  $[O_2^*]/[O_2] > 1$ , 增加的趋势渐缓; 继续增加, 曲线越来越平直。说

明把 $[O_2^*]/[O_2]$ 提高到超过 1 是必要的,但无需追求过高的 $[O_2^*]/[O_2]$ 比值。

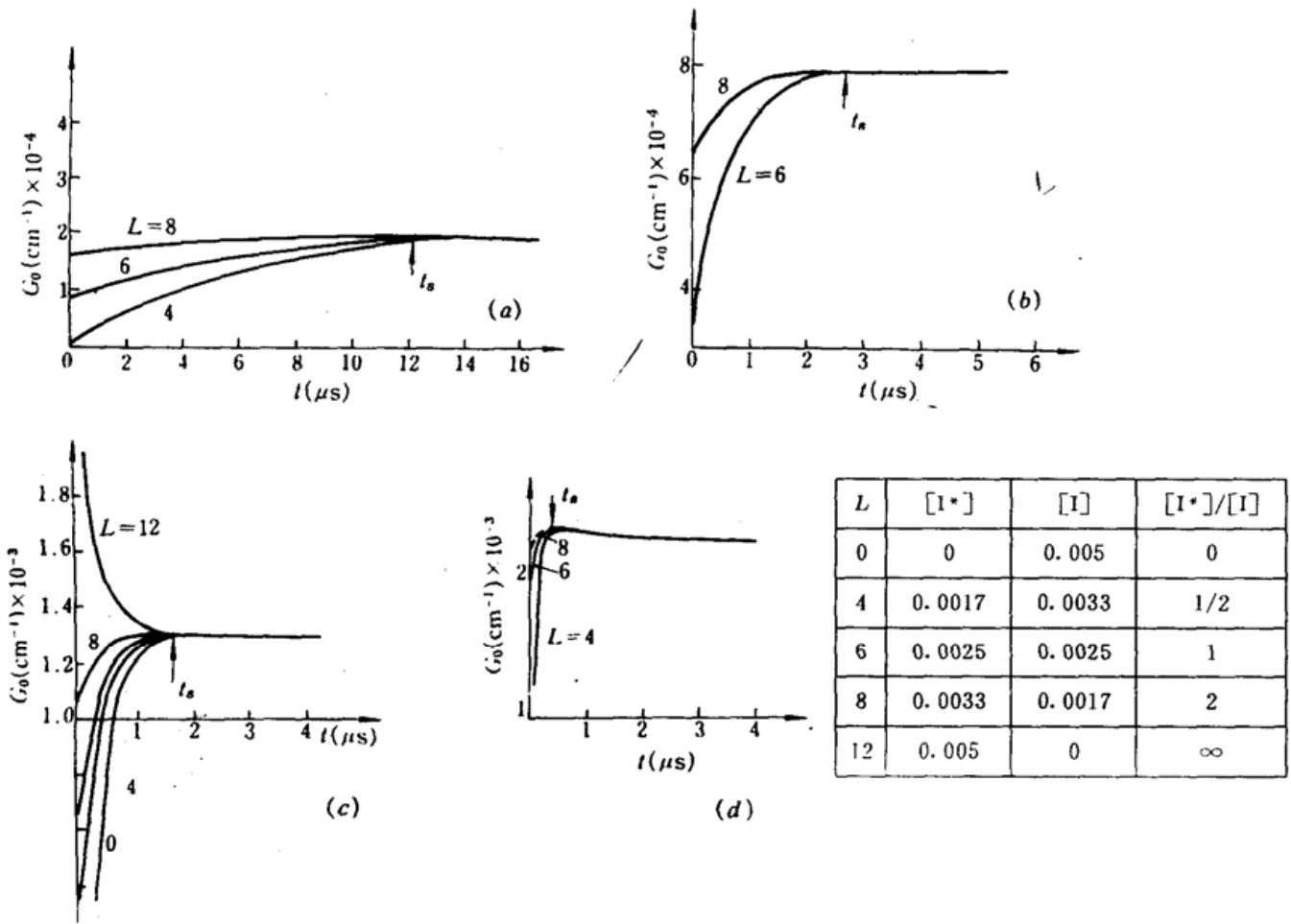


Fig. 2  $g$  versus  $L$  at different pressure

(a)  $P = 0.133$  kPa; (b)  $P = 0.665$  kPa; (c)  $P = 1.33$  kPa; (d)  $P = 6.65$  kPa

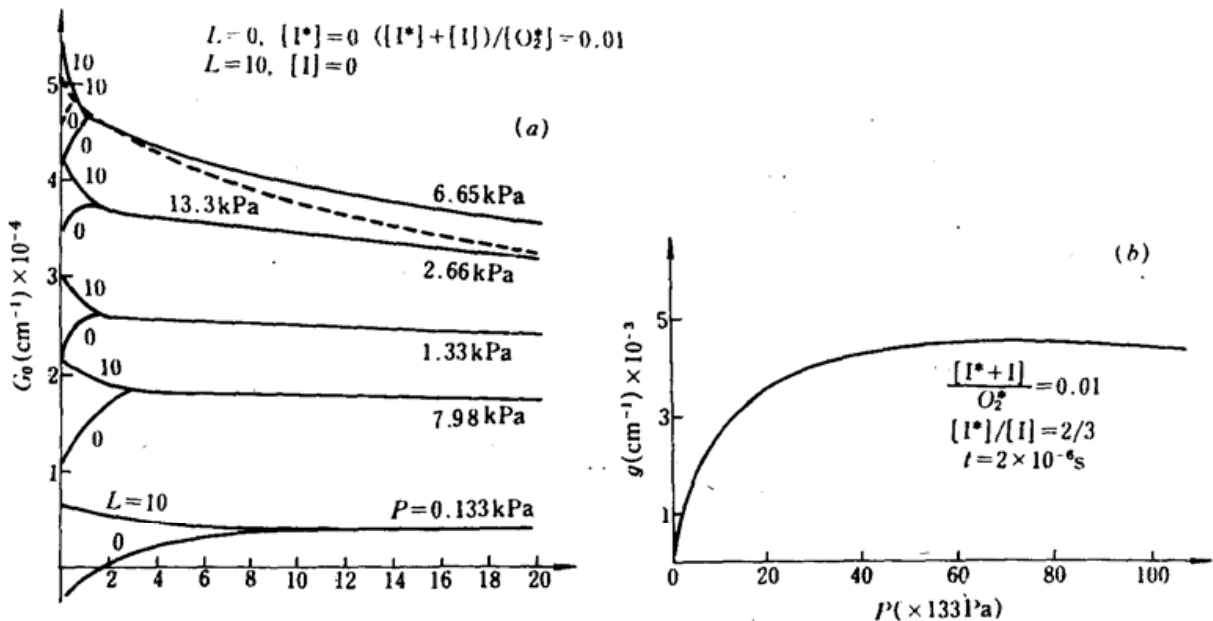


Fig. 3 The relationship between gain and pressure

(a) Gain distribution along  $t$  at different pressure; (b) Gain versus pressure

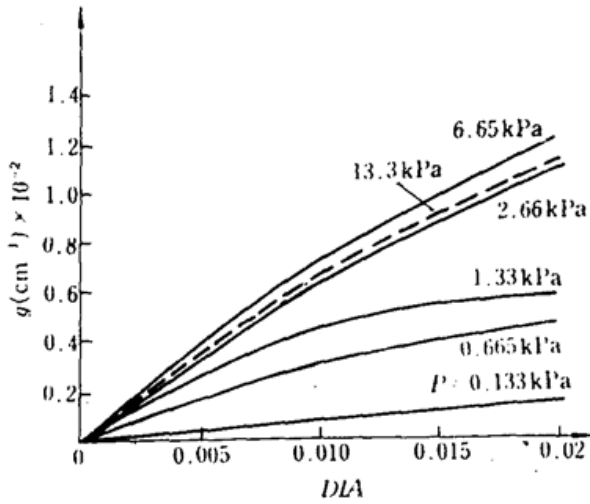


Fig. 4 The relation of  $G$ - $DIA$ - $P$

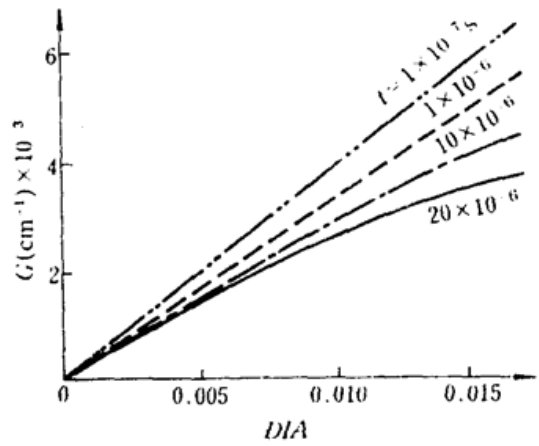


Fig. 5  $g$  versus  $DIA$  at different time

$(\text{O}_2^* + \text{O}_2) : \text{R1} : \text{N}_2 = 2 : 2 : 6;$   
 $[\text{O}_2^*]/[\text{O}_2] = 1/2, [1^*]/[1] = 2.0, P = 1.33 \text{ kPa}$

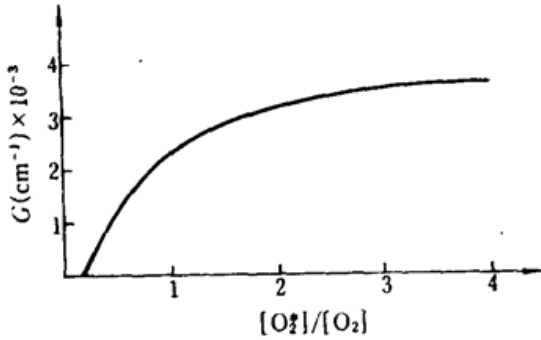


Fig. 6  $g$  versus  $[\text{O}_2^*]/[\text{O}_2]$

$(\text{O}_2^* + \text{O}_2) : \text{R1} : \text{N}_2 = 2 : 2 : 6;$   
 $P = 1.33 \text{ kPa}; t = 2 \times 10^{-6} \text{ s}$

感谢中国科学院大连化物所的支持和庄琦、冯浩以及张荣耀诸位教授对本课题的有益帮助。

### 参 考 文 献

- 1 N. G. Basov *et al.*, *Sov. J. Quant. Electr.*, **17**(5), 588(1987)
- 2 张荣耀 *et al.*, *中国激光*, **15**(8), 455(1988)
- 3 S. S. Penner, *Quantitative molecular spectroscopy and gas emissivities*, 26; G. A. Bird, *Molecular gas dynamics*, 215
- 4 庄琦 *et al.*, *中国激光*, **14**(6), 346(1987); 冯浩 *et al.*, *中国激光*, **14**(11), 646(1987); A. I. *et al.*, *Sov. J. Quant. Electr.*, **12**(4), 399(1982); G. E. Busch *et al.*, *IEEE J. Quant. Electr.*, **QE-17**(96), 1128 (1981)