

放电激励 XeF 激光器动力学的计算机模拟

陈建文 傅淑芬

(中国科学院上海光学精密机械研究所)

提 要

本文给出了放电激励 XeF 激光器的动力学过程的计算机模拟结果。反应方程式包含了 XeF 的形成、猝灭以及 Xe⁺、F⁻ 的吸收过程。在出现感应辐射的条件下,联合求解 Boltzman 输运方程、粒子数和光子数速率方程以及电路方程,最后将计算结果和实验值进行了比较。

一、引 言

激光动力学是探索激光辐射特性的重要内容,包括激光上能级粒子的产生、猝灭、辐射过程及激发机构等。自从准分子激光器问世以来,对它的动力学过程的研究就已引起了人们的重视。由于电激励混合气体中包含大量复杂的化学反应过程,初期的工作着重在辨认发生的反应,测量或计算各反应速率方面。目前这些速率已基本测定,并且得到了理论与实验符合得较好的结果,这使得进行动力学过程的模拟成为可能。

1976年, Wang 利用当时已有的一些数据,求得了实现激光反转的稳态 XeF* 数密度^[1],并在适当近似下给出一个解析表达式。1978年, Mkrtchyan^[2] 等用计算机模拟求解粒子数的动力学方程,讨论了 Xe*, Xe⁺, XeF* 及电子数密度随时间的变化。在计算中,没有考虑感应辐射影响,因此是对阈值以前的情况进行的计算结果。在 Mkrtchyan 的计算中,外加电压取方形波,即在一段时间内保持恒值,这个假设距准分子激光器的实际工作状态较远。我们采用实验中的电路方程,并与光子、粒子的数密度方程及放电的 Boltzman 方程联合求解。速率方程中包括了光子数密度方程,因此可以将计算结果与实验进行比较。

二、电路方程

实验中所用的电路^[3]可用图1的等效电路表示。回路1为脉冲形成部分,它由平板电容 C_1 和火花隙开关 S_G 组成, R_g 、 R_1 分别为火花隙开关和平板电容的电阻, L_1 是回路1的总电感,主要来自火花开关。回路2是储能部分, R_2 是平板电容 C_2 的电阻, L_2 是回路2的总电感。激光气体用电阻 R_L 表示。

$t=0$ 时, C_1 和 C_2 充到电压 V_0 , 并同时导通火花隙开关。电路方程可以写为

$$L_1 \frac{dI_1}{dt} + R_g I_1 + R_1 (I_1 - I_2) + \frac{1}{C_1} \int (I_1 - I_2) dt = V_0, \quad (1)$$

$$L_2 \frac{dI_2}{dt} + R_2 I_2 + \frac{1}{C_2} \int I_2 dt + R_1 (I_2 - I_1) + \frac{1}{C_1} \int (I_2 - I_1) dt = V_0. \quad (2)$$

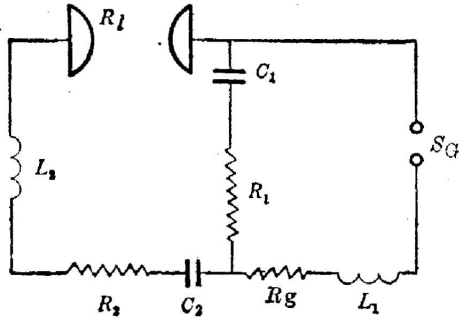


图1 等效电路

激光气体的电阻可用下述方法求得:

气体的电导率

$$\sigma = N_e e v_d / E, \quad (3)$$

其中 N_e 、 e 、 v_d 分别为电子数密度、电子电荷和电子的漂移速度, E 为两电极间的电场强度。于是

$$R_L = d / \sigma S = d \cdot E / n e v_d S, \quad (4)$$

S 为电流通过的截面积, d 为电极距。电子的漂移速度

$$v_d = \mu E, \quad (5)$$

其中 μ 是电子的迁移率, 它是与外场无关的常数, 将(5)式代入(4)式消去 E , 得到

$$R_L = d / e \mu N_e S_0. \quad (6)$$

加在气体上的电压为

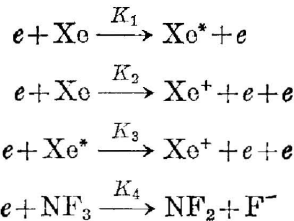
$$V_L = I_2 R_L, \quad (7)$$

其中 L_1 , L_2 , R_1 , R_2 , R_g 值由放电波形的测量估计。

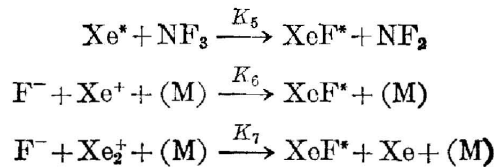
三、电激励激光气体混合物的反应方程及粒子数、光子数密度的速率方程

前已述及, 放电激励 XeF 激光器包含着很复杂的化学物理过程, 可以罗列很多个反应通道。为了讨论问题简便起见, 我们只计及一些主要过程。放电是在 He-Xe-NF₃ 混合物中进行的, 总气压在 2 个大气压以上。

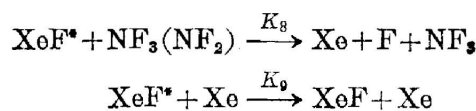
激发和吸附离解过程:

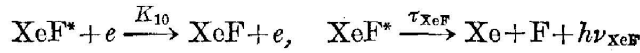


XeF 的形成过程:

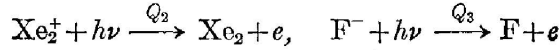


猝灭过程

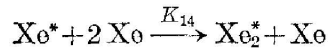
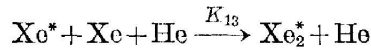
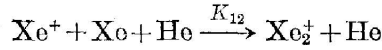
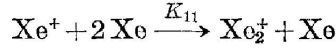




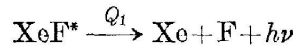
放电室内由于存在着 Xe_2^+ 及 F^- , 它们对 XeF^* 辐射波长存在着吸收:



其他过程



感应辐射:



在以上讨论中, 我们没有考虑 He 的激发和电离, 因此也没有考虑 He^* 对 Xe 的 Penning 电离。因为 He 的激发电位高达 19.6 eV, 在快速放电激励的准分子激光器中, 这种高能电子很少, 因此可以视 He 为透明体。

根据以上动力学反应方程式, 我们可以获得以下速率方程组

$$\begin{aligned} \frac{dN_{\text{Xe}^*}}{dt} = & K_1 N_{\text{Xe}} N_e - K_2 N_{\text{Xe}^*} N_e - K_5 N_{\text{Xe}^*} N_{\text{NF}_3} \\ & - K_{13} N_{\text{Xe}^*} N_{\text{He}} N_{\text{Xe}} - K_{14} N_{\text{Xe}^*} N_{\text{Xe}} N_{\text{Xe}} \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \frac{dN_{\text{Xe}^+}}{dt} = & K_2 N_{\text{Xe}} N_e + K_3 N_e N_{\text{Xe}^*} - K_6 N_{\text{F}^-} N_{\text{Xe}^+} \\ & - K_7 N_{\text{F}^-} N_{\text{Xe}_2^+} - K_{11} N_{\text{Xe}^+} N_{\text{Xe}} N_{\text{Xe}} - K_{12} N_{\text{Xe}^+} N_{\text{Xe}} N_{\text{He}} \end{aligned} \quad (9)$$

$$\frac{dN_e}{dt} = K_2 N_e N_{\text{Xe}} + K_3 N_e N_{\text{Xe}^*} - K_4 N_e N_{\text{NF}_3} - K_5 N_e N_{\text{NF}_3} \quad (10)$$

$$\frac{dN_{\text{F}^-}}{dt} = K_4 N_e N_{\text{NF}_3} - K_6 N_{\text{F}^-} - N_{\text{Xe}^+} - K_7 N_{\text{F}^-} - N_{\text{Xe}_2^+} \quad (11)$$

$$\frac{dN_{\text{Xe}_2^+}}{dt} = K_{11} N_{\text{Xe}^+} N_{\text{Xe}} N_{\text{Xe}} + K_{14} N_{\text{Xe}^*} + N_{\text{Xe}} N_{\text{He}} - K_7 N_{\text{F}^-} N_{\text{Xe}_2^+} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \frac{dN_{\text{XeF}^*}}{dt} = & K_5 N_{\text{Xe}^*} N_{\text{NF}_3} + K_6 N_{\text{F}^-} N_{\text{Xe}^+} + K_7 N_{\text{F}^-} N_{\text{Xe}_2^+} - N_{\text{XeF}^*} / I_{\text{XeF}} \\ & - K_8 N_{\text{XeF}^*} N_{\text{NF}_3} - K_9 N_{\text{XeF}^*} N_{\text{Xe}} - Q_1 c \phi N_{\text{XeF}^*} \end{aligned} \quad (13)$$

$$\frac{d\phi}{dt} = Q_1 c \phi N_{\text{XeF}^*} + \Delta N_{\text{XeF}^*} / \tau_{\text{sp}} - \phi / \tau_{\text{光子}} - \phi c (Q_2 N_{\text{Xe}_2^+} + Q_3 N_{\text{F}^-}) \quad (14)$$

以上诸式中: N_e , N_{Xe} , N_{NF_3} , N_{He} 分别为电子密度, Xe, NF_3 , He 分别为原子密度; N_{Xe^*} , N_{XeF^*} 分别为激发的 Xe 原子和 XeF 密度; Xe^+ , F^- 分别为 Xe 原子和 F 原子离子密度; Xe_2^+ 为 Xe_2 分子离子密度; ϕ 为谐振腔的光子数密度; c 为光速; Q_1 , Q_2 , Q_3 分别为 XeF 感应辐射截面、 Xe_2^+ 和 F^- 对 351 nm 辐射的吸收截面。

τ_{XeF} 为 XeF 的自发辐射寿命。按文献[4]:

$$\tau_{\text{XeF}} \times Q_1 = 64 \text{ \AA}^2 \cdot \text{ns}.$$

而 τ_{XeF} 报道的数值各不相同, 我们取 $\tau_{\text{XeF}} = 18.8 \text{ ns}$ 。

$\tau_{\text{光子}}$ 为光子在谐振腔内的寿命

$$\tau_{\text{光子}} = 2L/c(1-R_0),$$

式中 L 为腔长, R_0 为谐振腔的反射率。

在上列方程中, 我们作了以下假定:

(1) 由于 N_{Xe^*} , N_{Xe^+} , $N_{\text{Xe}^*} \ll N_{\text{Xe}}$, $N_{\text{F}} \ll N_{\text{NF}_3}$, 因此我们认为 N_{Xe} , N_{NF_3} 为恒定值。(2) 假定在所讨论的时间和空间范围内, 放电是均匀的和稳定的。(3) 在放电室两电极间电场分布是均匀的。

因此, 欲解方程(1)~(7), 只要给出激发的、电离的、激发态电离的和 NF_3 吸附的速率系数, 就可以对上述方程进行数值解。

四、反应速率系数的确定

在上述方程中, 除 K_1, K_2, K_3, K_4 外, 其他如 K_5, K_6, \dots, K_{14} 以及 Q_2, Q_3 均可视为与放电条件无关的常数, 我们可从文献[4]~[12]中查得。其中 K_1, K_2, K_3, K_4 是放电 E/P 值的函数, 为确定它们的值必须将对应的截面按电子能量分布取平均,

$$K_i = \int \sigma_i(\varepsilon) v(\varepsilon) n(\varepsilon) d\varepsilon \quad (i=1, 2, 3, 4), \quad (15)$$

$n(\varepsilon)$ 是归一化的电子能量分布函数, 它由求解放电的 Boltzman 方程得到, $v(\varepsilon)$ 为能量 ε 的电子的速度, $\sigma_i(\varepsilon)$ 是与能量 ε 的电子对应的反应截面。

根据我们对 Boltzman 输运方程的计算结果, 将文献[2]中给出的 K_1, K_2, K_3, K_4 近似式系数作适当调整, 使之在我们的 E/P 范围内与计算曲线符合得最好, 结果是

$$\begin{aligned} K_1 &\simeq 3.5 \times 10^{-11} (E/P)^{3/2} (P/P_{\text{Xe}})^{3/4} \\ K_2 &\simeq 7 \times 10^{-14} (E/P)^{7/2} (P/P_{\text{Xe}})^{4/3} \exp[-26.6 \sqrt{P_{\text{Xe}}/P} P/E] \\ K_3 &\simeq 2 \times 10^{-8} (E/P)^{1/3} (P/P_{\text{Xe}})^{1/6} \end{aligned}$$

K_4 是 E/P 值的减函数, 取线性近似

$$K_4 \simeq (4 \sim 8) \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1},$$

与计算曲线符合较好。

电子漂移速度由解 Boltzman 方程求得^[5], 它与 E/P 成线性关系, 显然, 直线的斜率 α 与 μ 的关系是 $\mu = \alpha/P$ 。我们的计算给出

$$\mu \simeq 6.1 \times 10^5 (\text{cm}^2 \cdot \text{atm/s} \cdot \text{kV}) \cdot \frac{1}{P},$$

其中 P 为激励气体的总气压。

五、计算结果及讨论

图 2 给出了激发态 $\text{Xe}^*(t)$, 电离态 $\text{Xe}^+(t)$ 和电子密度 $N_e(t)$ 随时间变化的曲线。总气压为 2.5 大气压, 充电电压为 42 kV, Xe 分压为 1%。

由图可见, Xe^* 的峰值密度 $\sim 9.6 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, 约占总 Xe 原子数密度的 1.6×10^{-3} ; Xe^+ 数密度的峰值 $\sim 7.3 \times 10^{13}$, 比 Xe^* 低一个量级。因此, 在上述条件下, 形成 XeI^* 的两个反应通道——离子通道和激发态通道, 将以激发态通道为主。

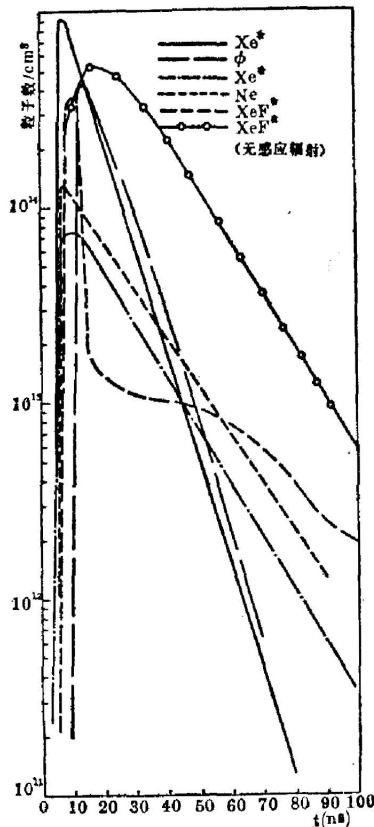


图2 电子数密度 N_e , 激发和电离的 Xe 原子、XeF⁺ 粒子和激光光子随时间变化曲线

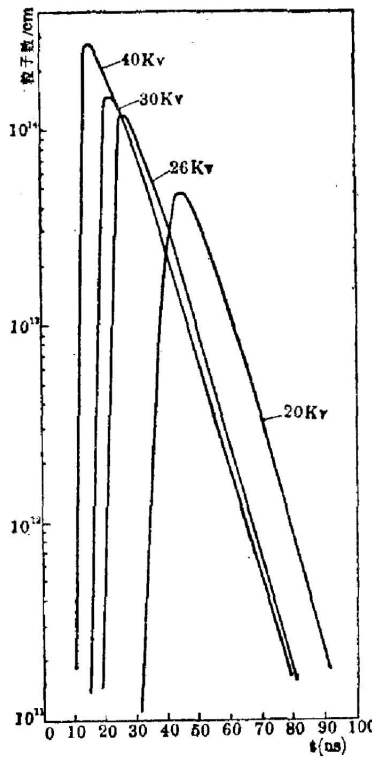


图3 脉冲光子数密度与充电电压的关系

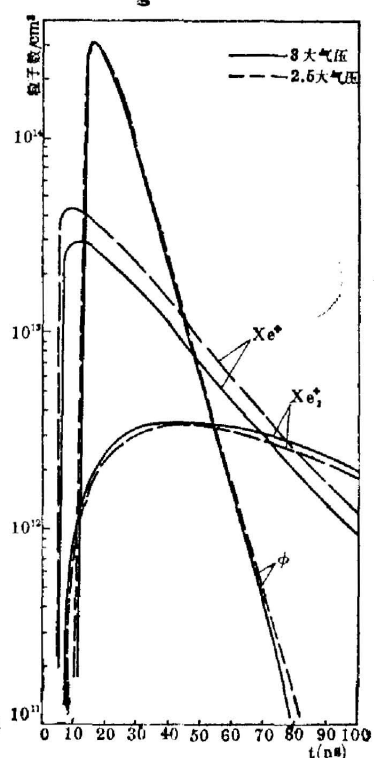


图4 总气压对脉冲光子数密度的影响

图2中也描绘了 XeF⁺ 和光子数密度随时间的变化, 光子数达到峰值比 XeF⁺ 延后 2~3 ns, 一旦光子数密度到达峰值, XeF⁺ 粒子迅速下降。按上述条件计算出每个脉冲的总光子数 $\sim 5.3 \times 10^{17}$, 相应的脉冲能量为 300 mJ。实验给出最大脉冲能量为 250 mJ, 而在通常条件下为 200 mJ。理论值是实验值的 1.5 倍左右。

图3给出不同充电电压时光子数密度的时间变化。可以看出, 电压越高, 输出脉冲光子数密度越高。从 Boltzman 输运方程求得的各反应系数亦表明, 电压的升高增强了 XeF⁺ 的形成反应, 从而提高了输出能量。

从图3还可以看到, E/P 值越低, 激光起振的时间延迟越长, 例如初始充电电压 20 kV 时起振时间延迟比 30 kV 时长一倍, 表明 XeF⁺ 数密度达到阈值的时间延迟随 E/P 增加而减小。同时, E/P 增大时, 总的 XeF⁺ 数增加, 激光脉宽加长。

图4是充电电压 40 kV、Xe 分压 1% 时计算的光子和 Xe⁺、Xe₂⁺ 粒子数密度的时间变化, 我们看到, 2.5 大气压和 3 个大气压时 Xe⁺ 和 Xe₂⁺ 有明显的不同, 光子数密度亦不同, 2.5 个大气压时输出比 3 个大气压高, 这与实验结果一致。3 个大气压时光子数密度低的原因之一是高压下 Xe₂⁺ 的增加, 增加了吸收损耗。

以上获得的结果与我们的实验测量结果是完全一致的。计算的脉冲能量高于实验值, 其主要原因是在上述计算模型中, 没有计入放电的不稳定性影响, 而这种不稳定的出现是影

响激光器输出能量的重要因素。

图 2 中还给出, 不计感应辐射时的 XeF^* 粒子数密度的时间波形。它的衰减由 XeF^* 寿命决定, 当电子数密度已降到很低时, 仍可保持相当的值。

参 考 文 献

- [1] C. P. Wang, O. L. Gibb; *IEEE J. Q. E.*, 1979, **QE-15**, No. 5 (May), 318.
- [2] M. M. Mkrtchyan, V. T. Platonenko; *Sov. J. Q. E.*, 1979, **9**, No. 8 (Aug), 967.
- [3] 傅淑芬、陈建文, 刘妙宏, 《物理学报》1980, **29**, No. 7 (Jul), 950.
- [4] M. Rokni, J. A. Mangano *et al.*; *IEEE J. Q. E.*, 1978, **QE-14**, No. 7 (Jul), 464.
- [5] E. R. Ault, R. S. Bradford Jr. *et al.*; *A. P. L.*, 1975, **27**, No. 7 (1 Oct), 413.
- [6] M. R. Flannery, T. P. Yang; *A. P. L.*, 1981, **32**, No. 5 (1 Mar), 327.
- [7] AD-A 016606.
- [8] W. Wadt; *A. P. L.*, 1977, **31**, No. 10 (15 Nov), 672.
- [9] A. Maddl; *Phys. Rev. (A)*, 1971, **3**, No. 1 (Jan), 251.
- [10] A. K. Bhattacharya; *A. P. L.*, 1970, **17**, No. 12 (15 Dec), 521.
D. Smith; *J. Phys (B)*, 1972, **5**, No. 5 (Nov), 2134.
A. P. Vitols, H. J. Qskam; *Phys. Rev. (A)*, 1977, **8**, No. 4 (Oct), 1860.
- [11] I. K. Rice, A. W. Johnson; *J. Chem. Phys.*, 1975, **63**, No. 12 (Dec), 5238.
- [12] P. K. Timpson, J. M. Anderson; *Canad. J. Phys.*, 1970, **48**, No. 15 (1 Aug), 1817.

Kinetic simulation of discharge-excited XeF laser

CHEN JIANWEN and FU SHUFEN

(Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Academia Sinica)

(Received 20 December 1980)

Abstract

Computer simulant results of kinetic processes of discharge excited XeF laser are given. The reaction equations involve formation, quenching of the XeF and absorption processes of Xe_2^+ , F^- , Boltzman transport equations, the particle and photo rate equations as well as circuit equation are solved together under inductive radiative condition. Finally the calculation results are compared with the experimental value.