

连续脉冲氯化亚铜激光过程的计算机模拟研究

史斌星 傅云鹏 余加莉 潘志文
(清华大学现代应用物理系)

提 要

本文通过解速率方程, 计算了连续脉冲氯化亚铜激光过程, 发现用迭代法解速率方程组有较好的收敛性。文中着重研究了管体温度对激光输出功率的影响, 发现当达到一定温度后, 由于亚稳态铜原子、 Cl^- 离子随温度增加而增加, 以及电子浓度随温度而减少引起了激光功率输出随管体温度增加而减少。

以计算机模拟气体激光过程是人们感兴趣的课题, 它有助于人们对激光过程以及气体放电的微观过程有一个较彻底的了解。近年来, 人们在这方面做了一些工作, 例如铜和卤化铜金属蒸气激光器的工作^[1~4], 但对卤化铜分子的微观参数(碰撞截面, 反应速率)方面的工作还比较少。本文对以 He 为缓冲气体的连续脉冲 CuCl (氯化亚铜) 激光过程作了计算和分析 CuCl 分子在电子及其他激发态原子碰撞下发生离解, 产生 Cu 原子或离子, 图 1 给出了 Cu 原子的几个能级。

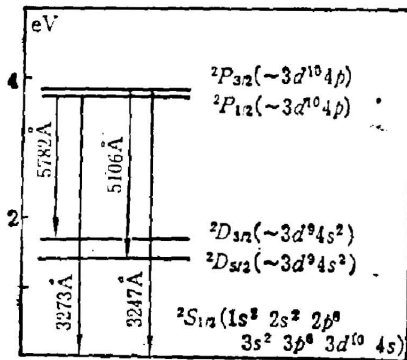


Fig. 1 Schematic diagram of the energy levels of copper atoms

铜原子密度, g_2, g_1 分别为激光上、下能级简并度, 那么激光功率与粒子反转数 $[\text{Cu} 2] - (g_2/g_1)[\text{Cu} 1]$ 有密切关系。

一、物理模型

为了简化计算, 设激光管中只有 CuCl 分子; Cu (基态)、Cu 1 (下能级)、Cu 2 (上能级); Cu^+ 离子; Cl 原子; Cl^+ 离子, Cl^- 离子以及 He 原子 (基态), He 1 (第一激发态, 亚稳态), He^+ 离子等物质, 且分别以 $[\text{CuCl}]$, $[\text{Cu}]$, $[\text{Cu} 1]$, $[\text{Cu} 2]$, $[\text{Cu}^+]$, $[\text{Cl}]$, $[\text{Cl}^+]$, $[\text{Cl}^-]$,

收稿日期: 1985年2月11日; 收到修改稿日期: 1985年8月27日

[He], [He 1] 和 [He⁺] 等, 表示它们相应的密度, 此外还有电子, 以 N_e 表示电子密度, 实际上远不止这些物质, 因此这只是一种近似模型, He 有较齐全的碰撞参数, 因此以它为工作物质进行计算和实验是有利的。

在放电场作用下, 电子被加速, 电子温度 T_e 上升, CuCl 受电子碰撞而离解, 产生 Cu 和 Cl 原子, Cu、Cl、He 原子也可被电子激发或电离, 被激发的原子又可能激发别的原子或分子……。计算中原则上应考虑上述所有可能的反应, 但不可避免要忽略其中次要过程。

我们在计算中采用下列模型:

- (1) 电子能量按麦克斯韦分布;
- (2) 电子与原子、分子的碰撞截面表示成电子温度的函数;
- (3) 激发态原子与其他原子、分子碰撞将失去能量或引起能量转移, 激发与电离其他原子;
- (4) 激光管正柱区中是完全等离子体。

二、计算方案

在上述模型的基础上, 可以得到一组速率方程, 即各种物质的密度随时间变化的方程。例如: 对 [Cu 1], [Cu 2] 的方程

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} [\text{Cu 1}] = & R'_i N_e [\text{CuCl}] + A' R_1 N_e [\text{Cu}^+] + A'_i R_2 N_e^2 [\text{Cu}^+] + A'_i \gamma_1 [\text{Cu}^+] [\text{Cl}^-] \\ & + A'_2 \gamma_2 [\text{He 1}] [\text{CuCl}] + A'_2 \gamma_3 [\text{He}^+] [\text{CuCl}] + Q_{01} N_e [\text{Cu}] \\ & + Q_{21} N_e [\text{Cu 2}] + A' (D_{Cu}^+ / A^2) [\text{Cu}^+] + A_{21} [\text{Cu 2}] + \{ [\text{Cu 2}] \\ & + (g_1 / g_2) [\text{Cu 1}] \} B_{21} \rho(\nu) - Q_{10} N_e [\text{Cu 1}] - Q_{12} N_e [\text{Cu 1}] \\ & - Q_{11} N_e [\text{Cu 1}] - \gamma_6 [\text{Cu 1}] \{ [\text{Cu}] + [\text{Cl}] + [\text{He}] \} - \gamma_7 [\text{Cu 1}] [\text{Cl}^-] \\ & - \gamma_8 [\text{Cu 1}] [\text{He 1}] - \gamma_9 [\text{Cu 1}] [\text{He}^+] - \gamma_{10} [\text{Cu 1}] [\text{Cl}] \{ [\text{Cu}] \\ & + [\text{Cl}] + [\text{He}] \} - (D_{Cu} / A^2) [\text{Cu 1}], \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} [\text{Cu 2}] = & R''_i N_e [\text{CuCl}] + A''_i R_1 N_e [\text{Cu}^+] + A''_i R_2 N_e^2 [\text{Cu}^+] + A''_i \gamma_1 [\text{Cu}^+] [\text{Cl}^-] \\ & + A''_2 \gamma_2 [\text{He 1}] [\text{CuCl}] + A''_2 \gamma_3 [\text{He}^+] [\text{CuCl}] + Q_{02} N_e [\text{Cu}] \\ & + Q_{12} N_e [\text{Cu 1}] + A'' (D_{Cu} / A^2) [\text{Cu}^+] - Q_{20} N_e [\text{Cu 2}] \\ & - Q_{21} N_e [\text{Cu 1}] - Q_{22} N_e [\text{Cu 2}] - A_{21} [\text{Cu 2}] - \{ [\text{Cu 2}] \\ & - (g_2 / g_1) [\text{Cu 1}] \} B_{21} \rho(\nu) - A_{20} [\text{Cu 2}], \end{aligned} \quad (2)$$

式中右边各项包括了 [Cu 1], [Cu 2] 增减的各种过程, 系数 R 、 γ 、 Q 为各种反应速率, i 表示电离态, A 为自发辐射系数, B 为受激辐射系数。 $\rho(\nu)$ 为单位频率间隔中光能密度, D 为扩散系数, A 为扩散长度。设激光管管长为 L , 管半径为 b , 则^[1]

$$(1/A)^2 = (\pi/L)^2 + (2.405/b)^2. \quad (3)$$

电子与 CuCl 分子有较复杂的反应过程, 也是计算中应考虑的最重要的反应之一。本计算中考虑了 CuCl 的下列几种离解反应:

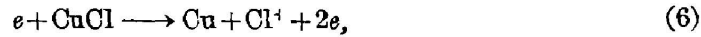
普通离解:



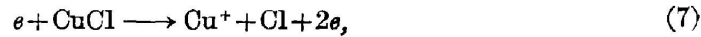
电子附着离解:



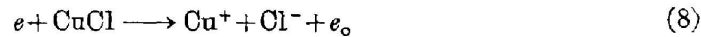
电离离解:



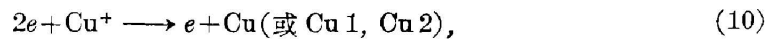
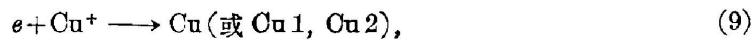
电离离解:



形成离子对离解^[5]:

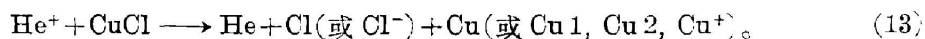
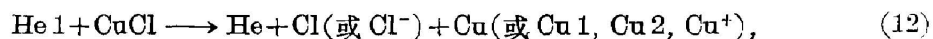
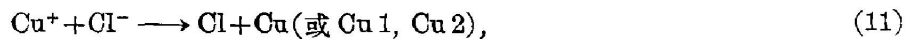


电子与 Cu^+ 复合成 Cu 或 $\text{Cu} 1, \text{Cu} 2$ 的反应为



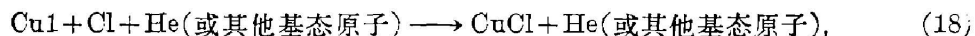
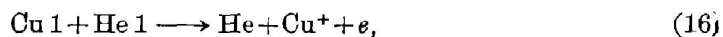
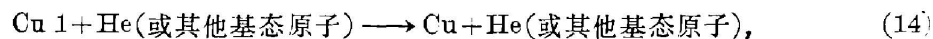
分别以 A_1, A_1', A_1'' 表示 Cu^+ 复合成这三种产物的相应几率, (10) 式虽然是一个三体反应, 但有相当大的反应速率不可忽略

$\text{He} 1, \text{He}^+, \text{Cu}^+, \text{Cl}^-, \text{CuCl}$ 间的反应有



在(1)、(2)两式中, 还考虑到了电子与铜原子的非弹性碰撞。例如, Q_0 表示电子使基态铜原子 Cu 过渡到 $\text{Cu} 1$ 态的碰撞速率, Q_{21} 为 $\text{Cu} 2 \sim \text{Cu} 1$ 的消激发速率, Q_{21}, Q_{21} 分别为 $\text{Cu} 1, \text{Cu} 2$ 的电离激发速率等等。 Cu^+ 在管中扩散与器壁碰撞后过渡到 $\text{Cu} (\text{Cu} 1, \text{Cu} 2)$, D_{Cu^+} 表示 Cu^+ 在 He 中的扩散系数。

(1)式中的负项中考虑了下列各反应:



这些项在(2)式中都略去, 因为 $\text{Cu} 2$ 的其他衰变过程有较大几率, 这些项的数值相对较小。

除 $\text{Cu} 1, \text{Cu} 2$ 外, 还要对其他原子、离子和分子各状态列出类似的速率方程。电子密度由下式求得:

$$N_e = [\text{Cu}^+] + [\text{Cl}^+] + [\text{He}^+] - [\text{Cl}^-]. \quad (19)$$

所有有电子参与的反应都与电子温度 T_e (即电子能量) 有关, 而原子、分子间的反应则与管体温度 T_g 有关, 电子温度可通过电子平均动能变化速率求得。

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \left[\frac{3}{2} kT_e \right] = & \frac{e^3 v^3}{L^3 m_e n_e} + \epsilon_{10}^{He} Q_{10}^{He} [He 1] + \epsilon_{10} Q_{10} [Cu 1] + (\epsilon_{20} Q_{20} + \epsilon_{21} Q_{21}) [Cu 2] \\
& + (\epsilon_{10} A_1 + \epsilon_{11} A_1' + \epsilon_{12} A_1'') [Cu^+] R_2 N_e + (\epsilon_{10}^{He} A_3 + \epsilon_{11}^{He} A_3') [He^+] R_3 N_e \\
& + \epsilon_{10}^{Cl} [Cl^+] R_4 N_e + \{ \epsilon_0 [Cu] + \epsilon_1 [Cu 1] + \epsilon_2 [Cu 2] \} \gamma_8 [He 1] / N_e \\
& + \{ \epsilon_{12} [Cl] \gamma_{12} [He 1] / N_e \} + \{ \epsilon_{11} [He 1]^2 \gamma_{11} / N_e \} \\
& - \sum_j \gamma_{eij} (2m_e / \mu_j) (3/2) k (T_e - T_g) - (D_e / \Lambda) (3/2) k (T_e - T_g) \\
& - (\epsilon_{01} Q_{01} + \epsilon_{02} Q_{02} + \epsilon_{04} Q_{04}) [Cu] - (\epsilon_{12} Q_{12} + \epsilon_{14} Q_{14}) [Cu 1] \\
& - \epsilon_{21} Q_{21} [Cu 2] - \epsilon_{14}^{Cl} Q_{14}^{Cl} [Cl] - (\epsilon_{01}^{He} Q_{01} + \epsilon_{04}^{He} Q_{04}) [He] - \epsilon_{11}^{He} Q_{11} [He] \\
& - (\epsilon_d R_d + \epsilon_7^{Cu} R_7^{Cu} + \epsilon_7^{Cl} R_7^{Cl} + \epsilon_d^{Cu} R_d^{Cu}) [CuCl]_e. \quad (20)
\end{aligned}$$

(20)式表示单个电子平均能量的增加速率, 包括各种途径所获得的能量(正项)与损失的能量(负项), 解上述各方程组成的联立方程组, 求得 [Cu 1], [Cu 2]。由下式可得激光光强的增长率

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} P = & \{ [Cu 2] - [Cu 1] (g_2 / g_1) \} B_{21} \rho(\nu) ch\nu \\
& + \alpha A_{21} [Cu 2] ch\nu - c \{ [(1-R)/L] + \theta \} P, \quad (21)
\end{aligned}$$

其中 α 为一几何因子, 该项表示沿激光束方向的自发辐射光, R 为输出镜片的反射率, θ 是与衍射损耗等有关的一个因子。各种碰撞截面及反应速率选自文献[1~13], 铜原子及其他离子扩散系数见文献[14~16], 铜原子自发辐射系数考虑了共振吸收改正^[17]。

三、计算结果与讨论

我们计算了以 He 为缓冲气体的 CuCl 激光器在各种管壁温度情况下的激光功率以及气体中各种成分的动力学分布, He 气压为 13 Torr, 管长为 50 cm, 管直径为 20 mm, 脉冲周期为 65 μ s。

图 2 给出当管壁温度 400°C 时, 激光输出功率与电子温度随时间的变化。光脉冲宽度为数十毫微秒量级。

图 3 给出了 Cu, Cu 1, Cu 2 密度随时间的变化曲线, 激光出现在 Cu 2, Cu 1 密度十分接近的时刻, 虽然 Cu 2 始终没有超过 Cu 1 的浓度。但条件 $[Cu 2] > (2/3) [Cu 1]$ 已得到满足, 便有激光产生, 但受激辐射使 Cu 2 很快减少, Cu 1 很快增加, Cu 1 是亚稳态去激很慢, 因此激光很快熄灭, 所以这种激光器只可能是脉冲形式的。

图 4 给出 400°C 时 [Cu 1], [Cu 2] 的增长速率曲线, 记成 $D Cu 1$, $D Cu 2$, 对比图 2 与图 4 可以清楚地看到开始时随电子温度的增加 $D Cu 1$ 和 $D Cu 2$ 都很快增加, Cu 2 很快就接近 Cu 1, 激光出现后 $D Cu 2$ 即迅速下降, 激光将逐渐消失, 随后 Cu 2 与 Cu 1 的差值不断

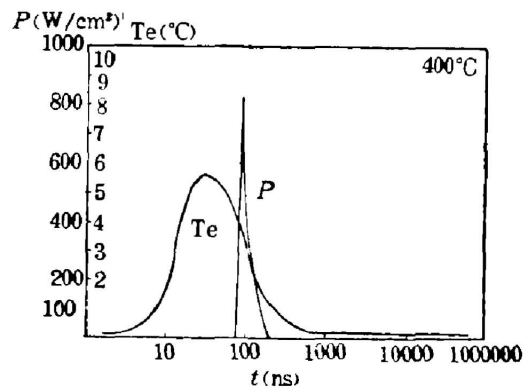


Fig. 2 Electronic temperature and laser output as functions of time

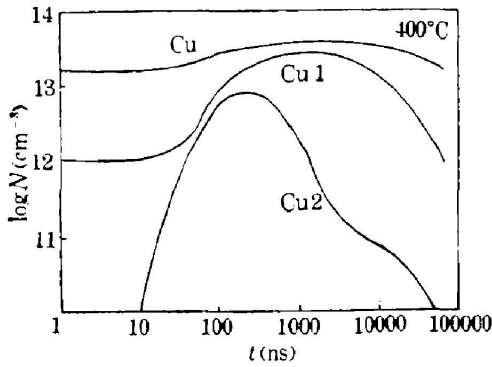


Fig. 3 Densities of copper atoms in the ground state, the upper and the lower laser levels as functions of time

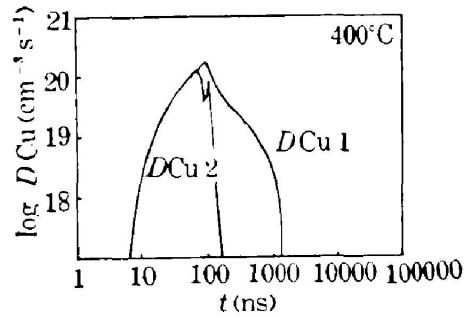


Fig. 4 The time rate of change of copper densities in the upper and lower laser levels at 400°C tube temperature as functions of time

加大, 因此在一个电脉冲只出现一个光脉冲, 在图 4 的曲线中出现的尖峰和谷, 是受激辐射突然出现造成的。

Cu 2 主要通过电子激发 Cu 而得到, 因此电脉冲开始时 Cu 与 Cu 1 的比值对激光功率有很大影响, Cu 的密度不仅取决上一脉冲后的残存值, 还与 CuCl 的浓度和分解速率有关, 例如管体温度增高, CuCl 浓度增大, Cu 2 增多, 但 CuCl 还有一实的比例分解成 Cu 1, Cu⁺, Cl, Cl⁻..., 其中 Cu 1 和 Cl⁻ 数产生不利的影响, 因此不是温度越高激光功率越大, 根据测量和计算, 发现管壁温度较低时, 激光功率随温度增加而增加, 但温度大于某一数值后, 输出功率反而随温度增加而减少。图 5 给出了实验值与计算值的比较, 理论值约在 420°C 左右出现峰值, 实验值在 380°C 处出现峰值。

为了研究各种因素对激光输出功率的影响, 我们在不同条件下对各种因素进行了计算与比较。例如, 图 6 是不同温度下的 DCu 1 与 DCu 2 曲线, 图 7 是不同温度下的 [Cu 1] 与 [Cu 2] 曲线, 图 8 是不同温度下电子密度与氮离子密度, 还有其他等等。综合分析这些数

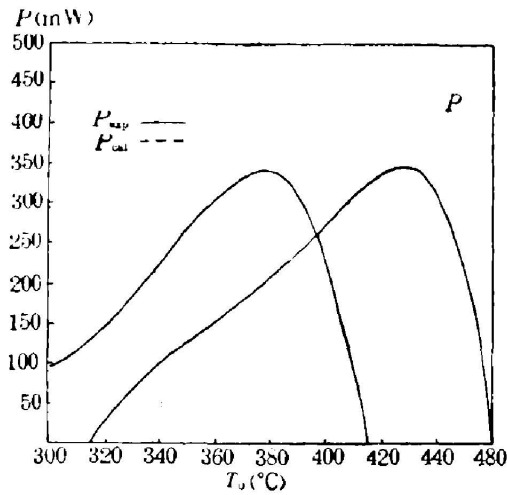


Fig. 5 Comparison of the experimental laser output result P_{exp} with the calculated result P_{cal}

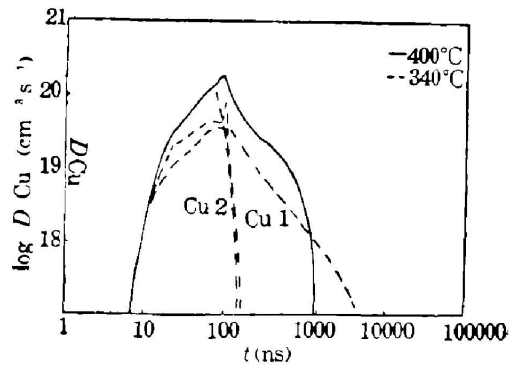


Fig. 6 The time rate of change of copper densities in upper and lower laser levels at different tube temperatures as functions of time

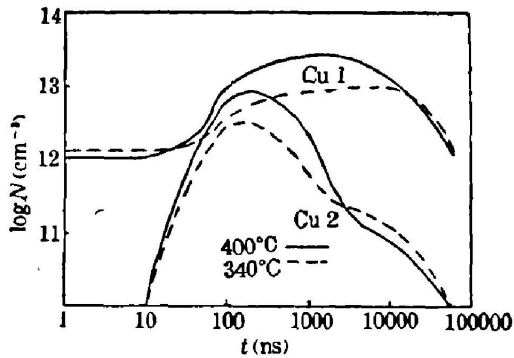


Fig. 7 Densities of copper atoms in upper and lower laser levels at different tube temperatures as functions of time

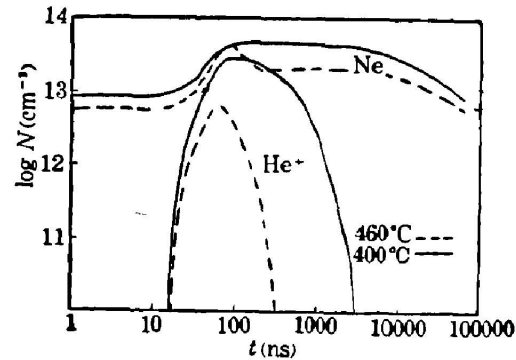


Fig. 8 The electronic density and the density of helium ions at different tube temperatures as functions of time

据,我们可以对最大激光功率输出作出定性解释。

总之,对于 CuCl 激光器来说,由于存在 CuCl 的分解和复合过程,它和纯铜激光器有很大的差别,CuCl 的分解速率以及它分解的各种成分的相对比例都是决定这类器件工作效率的重要因素,在这方面的实验和理论研究还十分少,因而给计算造成一些困难。但是在其他参数确定的条件下,也可以通过我们的计算反过来为确定这类反应的截面和速率提供一些依据。

在此,感谢姚有光、陈国坤同志对我们在使用计算机中给予的协助。

参 考 文 献

- [1] M. J. Kushner *et al.*; *J. Appl. Phys.*, 1980, **51**, No. 6 (Jun), 3020.
- [2] M. J. Kushner; *IEEE J. Q. E.*, 1981, **QE-17**, No. 8 (Aug), 1555.
- [3] K. G. Harstad; *IEEE J. Q. E.*, 1980, **QE-16**, No. 5 (May), 550.
- [4] K. G. Harstad; *IEEE J. Q. E.*, 1983, **QE-19**, No. 1 (Jan), 88.
- [5] L. G. Christophorou; *Atomic and Molecular Radiation Physics*, (John Wiley & Sons Ltd 1971).
- [6] G. C. Tisone *et al.*; *Phys. Rev.*, 1968, **170**, No. 1 (Jan), 169.
- [7] J. W. Copper *et al.*; *Phys. Rev.*, 1962, **126**, No. 4 (Apr), 1432.
- [8] C. Dentsch; *J. Appl. Phys.*, 1973, **44**, No. 3 (Mar), 1142.
- [9] S. Trajmar *et al.*; *J. Phys. (B): Atom. Molec. Phys.*, 1977, **10**, No. 16 (Aug), 3323.
- [10] A. Z. Msezane *et al.*; *XII International Conference of Physics of Electronic and atomic Collisions*, (Gatlinburg, Tennessee, 1981), 176.
- [11] N. Winter *et al.*; "Review of Electron Impact Excitation Sections for Copper Atom," Lawrence Livermore National Lab. Livermore, California. UCID-19314 (1982).
- [12] M. J. Kushner; *J. Appl. Phys.*, 1983, **54**, No. 6 (Jun), 2970.
- [13] B. C. Sze *et al.*; *J. Appl. Phys.*, 1982, **53**, No. 3 (Mar), 1312.
- [14] I. Koshinar *et al.*; *Opt. Spectrosc.*, 1981, **50**, No. 1 (Jan), 33.
- [15] M. A. Biondi; *Phys. Rev.*, 1953, **90**, No. 5 (Aug), 730.
- [16] M. A. Biondi; *Phys. Rev.*, 1954, **93**, No. 6 (Sep), 1136.
- [17] T. Holstein; *Phys. Rev.*, 1951, **83**, No. 6 (Sep), 1159.

Computer simulated rate processes in continuously pulsed CuCl lasers

SHI BINXING, FU YUNPENG, YU JAILEE AND PAN ZHIWEN

(Department of Modern Applied Physics, Qinghua University, Beijing)

(Received 11 February 1985; revised 27 August 1985)

Abstract

We have calculated the lasing process in a continuously pulsed CuCl laser with rate equations and found that the calculation converges rapidly in the iterative procedure with a set of carefully chosen initial values. Therefore, solutions can be obtained on a microcomputer. The relation between the laser output and tube wall temperature has been studied. Results indicate that Cl^- anions are important for the laser output.