

连续波氧碘化学激光器增益特性的模拟计算与分析

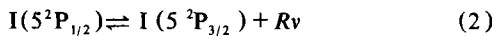
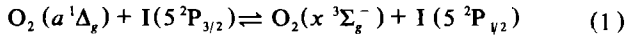
陈丽吟 楚泽湘

(中国科学院力学研究所 北京 10080)

摘 要 本文用一个简化模型从理论上系统地研究了CW OICL的增益系统及其与组份、压力、流速的关系,并得出了一些规律性的结果。研究的范围是: $[O_2^+]/[I_2] = 10 \sim 200$, $[O_2^+]/[O_2] = 2 \sim 9$, $P = 1 \sim 100$ torr, $U = 5 \sim 100$ m/s。详细探讨了流动守恒方程组对计算CW OICL的重要性。指出提高流速几乎不影响峰值增益,而有助于按与流速成比例地扩大可用增益区。

关键词 氧碘化学激光器 增益系统 流速

氧碘化学激光器(OICL)是目前最受重视的大功率气体激光器之一,能产生大功率近红外激光辐射,波长为1315 nm,倍频之后发射可见红外辐射(657nm)。由于它在材料加工、医学、光纤输送和高技术科学研究等领域的可能潜在应用,近年来获得迅速发展。关于激光器增益性能的理论工作已有一些报导^{[1][4]},但研究还不够系统。它的核心反应是:(为方便起见,下文用 O_2 、 O_2^+ 、 O_2^{++} 代替 $O_2(x^3\Sigma_g^-)$ 、 $O_2(a^1\Delta_g)$ 和 $O_2(b^1\Sigma_g^+)$; 用 I、I' 代替 $I(5^2P_{3/2})$ 、 $I(5^2P_{1/2})$)



$$\nu = 7605 \text{ cm}^{-1}$$

反应(1)是近共振可逆过程,见图1,反应(1)、(2)循环往复,把储存在 O_2^+ 中的能量不断传给 $I(5^2P_{1/2})$,继而转化为光能。所以 O_2^+ 是能源库, I' 和 I 是产生粒子数反转、发射激光的激活介质。 O_2^+ 一般用氧的化学发生器产生,化学效率 $\approx 100\%$ 。 O_2^+ 是亚稳态,寿命长、经长管输送到光腔进口处, $[O_2^+]/[O_2]$ 仍能维持在30%~80%,超过了常温下碘原子发生粒子数反转的需要值 $[O_2^+]/[O_2] \geq 0.176$ 。碘原子由碘分子在光腔中与激光混合物相互作用自动生成,见附录。

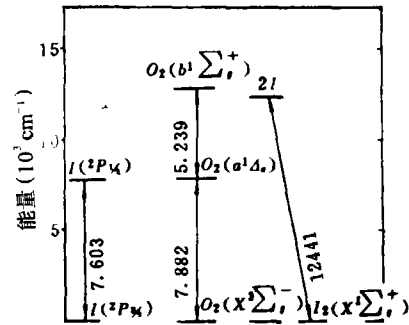


图 1

一、基本方程

激光混合物中各类组元在光腔内相互作用的过程是复杂的。除了上述核心化学反应外还有其他化学过程、碰撞驰豫、原子复合、分子分解及出光导过程,各类组元的浓度沿流动方向不断发生变化。这些现象可以用组元粒子数变化速率方程组、流动守恒方程组、增益和光输出方程描述。这些方程联立组成完整的描述激光器性能的系统方程。严格地说所有组元及物理量都是空间和时间的函数,难以用解析方法求解。包含时间和空间变量的问题用计算机数值求解意味着大工作量、费时和高难度。所以往往在合理假定下做近似计算,只企图把握问题的主要性质和规律。

本文研究连续流动氧碘化学激光器的增益系数。假定流动是定常和一维的。模型简化为: A 流(含 I_2 和 N_2 或 Ar)和 B 流(含 $O_2 + O_2^+ + O_2^{++}$ 和 N_2 或 Ar)在光腔进口处瞬时混合,均均地沿 x 方向流动,见图2。激光混合物中的各类组元在每一 x 点沿 y-z 平面均匀分布。由于流动过程中发生各种微观动力学过程,组元浓

1992年1月2日收到来稿。

度沿 x 方向有变化。

A 、 B 流混合后有七种组元, 他们是 O_2 、 O_2^* 、 O_2^{**} 、 I^* 、 I 、 I_2 和 N_2 (或 Ar), N_2 是缓冲气体, 不参与化学反应, 只需考虑六个组元速率变化微分方程。

$$\frac{dN_i}{dt} = \left(\frac{dN_i}{dt}\right)_{\text{生成}i\text{组元}} - \left(\frac{dN_i}{dt}\right)_{i\text{组元消失}} + \frac{\delta_i G I_A}{h\nu} + \delta_i A_{21} N_i^* \quad (1)$$

$i=1, 2, \dots, 6$ 代表上述各组元。当 i 代表 I^* , $\delta_i = -1$; i 代表 I , $\delta_i = 1$, 其它组元 $\delta_i = 0$ 。流动守恒方程组为:

$$U \frac{dT}{dx} = \frac{N_0}{N_T \sum_i (\psi_i C_{p,i})} \left\{ \sum_i \left[\left(\frac{h_i - C_{p,i} T}{N_0} \right) \cdot U \frac{dN_i}{dx} \right] - \frac{G \cdot I_A \cdot 10^{-7}}{HW} - mU^2 \frac{dN}{dx} \cdot \frac{10^{-7}}{HW} \right\} \quad (2.1)$$

$$\frac{dU}{dx} = \frac{R \cdot U \cdot \left(\frac{dT}{dx} \right)}{RT - U^2 M} \quad (2.2)$$

$$\frac{d\rho}{dx} = - \frac{\rho \cdot R \cdot \frac{dT}{dx}}{RT - U^2 M} \quad (2.3)$$

$$P = N_T kT \quad (2.4)$$

$$N_T = \sum_{i=1}^7 N_i \quad (2.5)$$

这里 ψ_i 、 $C_{p,i}$ 、 h_i 、 N_i 是第 i 种组元的克分子分数、定压热容量、生成热和分子数密度; M 、 G 、 I_A 分别为分子量, 增益系数和辐射强度; m 是单位体积分子质量。 N_0 、 R 、 k 、 A_{21} 分别是 Avogadro 数、气体常数、Boltzmann 常数和从 I^* 到 I 和自发辐射系数。 HW 为热力学当量。 本文不考激光输出, 故 $I_A = 0$ 。 N_T 是单位体积总分子数、 T 、 U 、 ρ 、 P 分别代表常用的温度、流速、密度和压力符号。 在谱线中心增益方程为:

$$G = \frac{\lambda^2 \cdot A_{21}}{4\pi\Delta\nu_D} \left(\frac{\ln 2}{\pi} \right)^{1/2} \cdot (N_I^* - N_{I/2}) \cdot V(a) \quad (3.1)$$

$$V(a) = \exp(a^2) [1 - \operatorname{erf}(a)]^{[2][13]} \quad (3.2)$$

$$\operatorname{erf}(a) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^a \exp(-x^2) dx \quad (3.3)$$

$$a = (\ln 2)^{1/2} (\Delta\nu_D / \Delta\nu_c) \quad (3.4)$$

$\Delta\nu_c$ 、 $\Delta\nu_D$ 分别代表 Doppler 加宽和压力加宽分宽度。 因同时考了两种加宽, 增加公式可适用于较大的压力范围。 $a \leq 0.1$, $V(a) \approx 1$, 为纯粹 Doppler 加宽; 当 $a > 4$, 对应完全压力加宽, 这时

$$V(a) \longrightarrow \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \quad (3.5)$$

当 $0.1 < a < 4.0$, 相当于 $P = 20 \rightarrow 100$ torr, 必须同时考虑两种加宽的影响。

原则上, 将方程(1)、(2)和(3)联立, 给定光腔进口处各参量初值, 用龙格库塔法沿流动方向对方程组做数值积分, 空间每一点的各种组元浓度、 T 、 ρ 、 P 、 U 和 G 可全部求出。 我们采用分区段变步长的办法, 使绝大多数增益系数数值确保三位有效数准确。

计算的初始条件为: $T = 300$ K, $P = 1 \sim 100$ torr, $U = 5 \sim 100$ m/s, $[O_2^*]/[I_2] = 10 \sim 200$, $[O_2^*]/[O_2] = 2 \sim 9$, 各基元过程的速率系数应该是温度的函数 $k = k(T)$, 但由于数据不全或有些反应同作者给出的 $k(T)$ 关系不很一致, 所以计算中还是用了 $T = 300$ K 时的速率系数。

二、结果与讨论

图 3 是各种组元数密度沿流动方向分布图。 运转条件不同各组元数密度沿 x 方向的线型也会不同。 因增

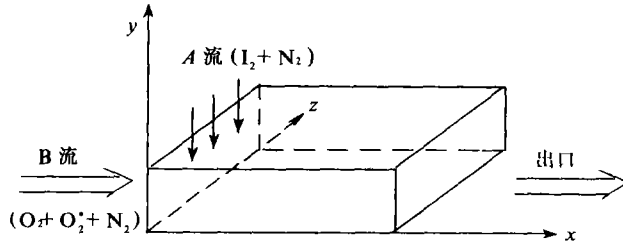


图 2

益与 $(N_i - N_i/2)$ 成比例, 增益大小取决于当地 N_i 和 N_j 的值。

1. 耦合与未耦合解

为了解流动对增益系数的影响, 我们做了两部分工作。(I) 只解组元浓度方程组与增益方程(即联立方程 (1) 和 (3)), 此解称为未耦合解; (II) 将流动方程组考虑在内, 方程(1)、(2)、(3) 完全联立, 其解称为耦合解。并比较 (I)、(II) 结果。

(1) 两种解对峰值增益的影响

研究了 P 从 1-100 torr, $[O_2^+]/[I_2]$ 从 10 到 100 范围内峰值小信号增益 G_m 对 $[O_2^+]/[I_2]$ 关系。图 4 分别是未耦合解(I)和耦合解(II)的结果。从图中可以看出, 二者的 $G_m \sim [O_2^+]/[I_2]$ 曲线相似。第一根 $G_m \sim [O_2^+]/[I_2]$ 曲线都有一个峰值, 各种压力下 $[O_2^+]/[I_2]$ 的最佳比值都约在 60 ~ 100 之间。

上述结果表明, 在我们研究的很宽的压力和 $[O_2^+]/[I_2]$ 范围内, 气流对峰值增益的影响很小, 尤其是在高压高碘浓度运转条件下, 更是如此, 从下面图 5 ~ 8 亦可看出。

(2) 流动方程对增益沿流动方向分布的重要性

图 5 是碘浓度不同的情况下增益系统 G 沿流动方向的

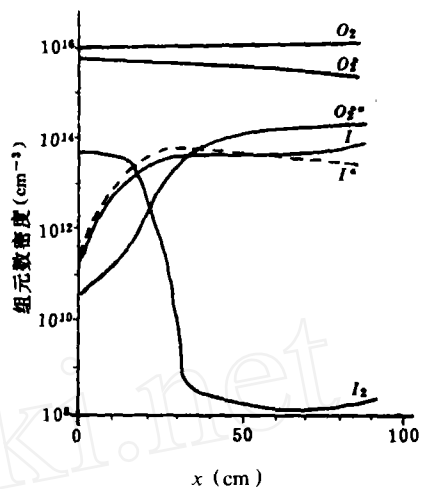


图 3 OICL 各组元粒子数沿流动方向分布
 $[O_2^+]:[O_2]:[I]:[N_2]=1:2:0.01:2$,
 $T=300K, P=1 \text{ torr}, U=14.7\text{m/s}$

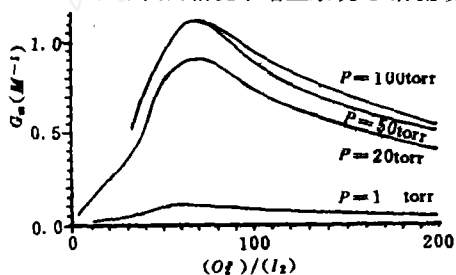


图 4(a) 未与流动方程耦合的结果

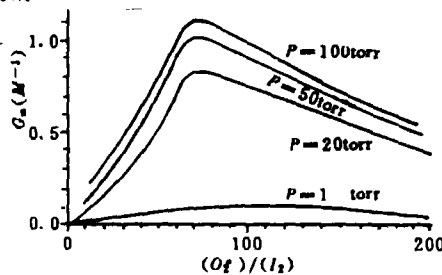


图 4(b) 与流动方程耦合的结果

图 4 各种压力下碘浓度对峰值增益系数的影响

成份: $[O_2^+]:[O_2]:[I]:[N_2]=1:2:[I_2]:2$, $U=14.7\text{m/s}$

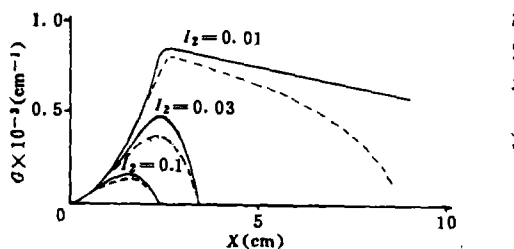


图 5(a) P = 1 torr

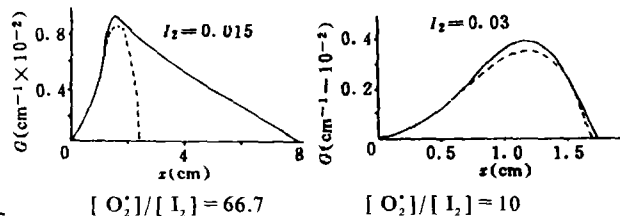
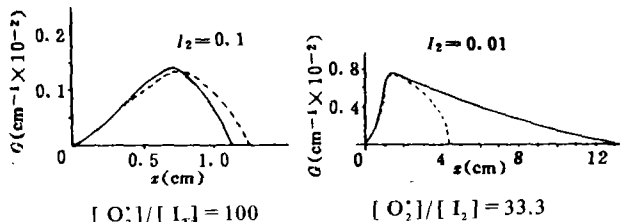


图 5(b) P = 20 torr

$U=14.7\text{m/s}, [O_2^+]:[O_2]:[I_2]:[N_2]=1:2:[I_2]:2$

--- 耦合解 ——— 未耦合解

图 5 G 沿 x 分布

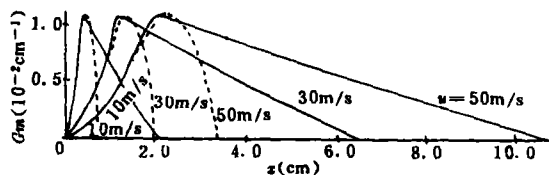


图 6 D-U-x 关系

$P=50 \text{ torr } [O_2^+]:[O_2]:[I_2]:[N_2]=1:2:0.015:2$

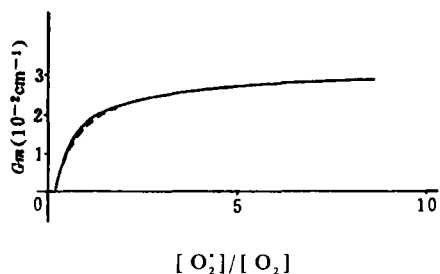


图 7 $G_m \sim [O_2^*]/[O_2]$ 关系 $P=20$ torr
 $[O_2^*]:[O_2]:[I_2]:[N_2]=1:2:0.015:2$
 - - - - 耦合解 ——— 未耦合解

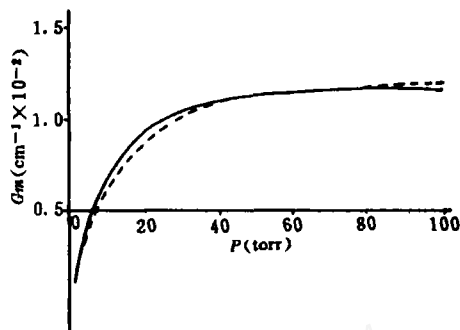


图 8 $G_m \sim P$ 关系
 $[O_2^*]:[O_2]:[I_2]:[N_2]=1:2:0.015:2$
 - - - - 耦合解 ——— 未耦合解

分布曲线。其中虚线代表包括流动方程在内的耦合解。

从图 5 可以看出，不论 $P=1$ torr，还是 $P=20$ torr，

(甚至扩展到 $P=100$ torr)。两条增益曲线上趋势都基本重合，峰值增益也相差不多，这时耦合与未耦合解增益线型没有什么不同。越过增益峰值以后曲线下降趋势就很不一样。 $[I_2]$ 较小时，如 $[O_2^*]/[I_2] > 3.33$ ，实线(代表未耦合解)以较小斜率线性下降。 $[I_2]$ 越小，下降越慢，增益区拉得就越长。虚线(耦合解)与此不同，越过增益峰值以后，曲线迅速而陡峭下降。 $[I_2]$ 越大，下降就越快，使正增益区大大缩小。当 $[O_2^*]/[I_2] \leq 3.33$ ，不论虚线还是实线，下降都很快，且耦合解、未耦合解增益区宽度都差不多，曲线线型相似且基本重合。详见图 5 和表 1。这种现象在 $P=1-100$ torr 范围内都存在。当 $[O_2^*]/[I_2] \leq 50$ ，考虑了流动方程组之后，增益缩小了 2~3 倍。当 $[O_2^*]/[I_2] \leq 33.3$ ，二者增益区几乎重合。说明在低运转压力 and 低 I_2 浓度时，运算 CW OICL 性能能不能不考虑流动因素。

影响两种解结果异同的原因是综合因素形成的。定性地说，耦合解引入了流动方程组，在光腔前区，因为时间短、热现象不明显。后来，随着时间增长，化学放热和碰撞弛豫热使光腔温度升高(于是介质流速也增大)，见表 1。造成激光介质诸成份，尤其是激光上、下能级数密度减小，引起增益下降。当 $[I_2]$ 较大、压力较高时， I_2 分子对 I^* 和 O_2^* 碰撞弛豫加快。相比之下， T 、 U 影响降为次要因素，两种曲线就基本重合了。

由于高运转压力下增益区变窄，(如 $[O_2^*]/[I_2] \leq 33.3$ 范围， $P=20$ torr， $x_E=1.7$ cm； $P=50$ torr， $x_E=0.67$ cm； $P=100$ torr， $x_E=0.33$ cm，见表 1， x_E 为 $G=0$ 时的 x 位置。)器件失去了实用价值。这就是为什么连续波氧碘化学激光器大多在较低压力下如 $P < 10$ torr 和较小碘浓度条件下运行的原因之一。

表 1 增益区宽度及有关参数 — 耦合与未耦合解的比较

设： x_E (cm)、 T_E (K)、 U_E (m/s) 为 G 下降至零时的 x 、 T 、 U 、 G_m (cm⁻¹)、 x_m (cm) 为峰值增益及其位置， $[O_2^*]:[O_2]:[I_2]:[N_2]=1:2:[I_2]:2$

表 1.1 $P=1$ torr

$[I_2]/[O_2^*]$	0.01					0.1				
	G_m	x_m	x_E	T_E	U_E	G_m	x_m	x_E	T_E	U_E
未耦合解	8.4×10^{-4}	26	~200	300	14.7	1.5×10^{-4}	14.7	23.4	300	14.7
耦合解	7.9×10^{-4}	28	87	587	28.9	1.3×10^{-4}	15	23.5	591	29

表 1.2 $P=20$ torr

$[I_2]/[O_2^*]$	0.01					0.1				
	G_m	x_m	x_E	T_E	U_E	G_m	x_m	x_E	T_E	U_E
未耦合解	7.3×10^{-3}	1.27	12.6	300	14.7	4.0×10^{-3}	1.2	1.74	300	14.7
耦合解	7.3×10^{-3}	1.32	4.4	600	30	3.5×10^{-3}	1.2	1.69	619	31

2. 流速对增益系数的影响

图 6 表明, 流速加大增益上升趋势较为缓慢, 使增益峰值后移。在我们讨论的范围, 后移的量几乎与流速成正比。保持其它运转参数不变只改变流速并不影响增益峰值的大小, 但可按与流速成比例地扩大可用增益区。简单地说, 固定运转条件下流速增大一倍, 在相同时间内气流输送的距离几乎扩大了一倍。所以加大流速, (可以是亚声速或超音声速) 可使原本较窄的增益区加宽, 从而有可能扩大运转压力和碘浓度实用范围。

3. $[O_2^*]/[O_2]$ 对增益的影响

图 7 反映了 $[O_2^*]/[O_2]$ 从 0.2 变到 9 范围内峰值增益 G_m 的变化趋势。 $[O_2^*]/[O_2]$ 较小, G_m 随 $[O_2^*]$ 相对浓度增高而增高。当 $[O_2^*]/[O_2]$ 超过 4, 曲线开始呈饱和状态, 增益无明显增加。因此不必追求过高的 $[O_2^*]/[O_2]$ 比。实际上实验也很难做到很高的 $[O_2^*]/[O_2]$ 比。

4. 压力的作用

从图 4 和图 8 看出, 压力从 1 torr 提高到 50 torr, 峰值增益提高了一个数量级。如 $P=1$ torr, $G_m \sim 8 \times 10^{-4} \text{cm}^{-1}$ 。 $P=50$ torr, $G_m \sim 1 \times 10^{-2} \text{cm}^{-1}$ 。压力超过 50 torr, 曲线开始变得平直。因为压力不是太大时, Γ 和 I 数密度随压力增加相应增加, 增益也随之上升。当压力超过 50 torr, 碰撞弛豫过程起更大作用。于是增益曲线持平逐渐下降。因为 Γ 在高压下更快地弛豫了。

我们的模型比较简单和理想, 没有考虑两股流在光腔进口处的混合过程。但仍给出了一些有用的规律性结果。本文计算结果和已发表的数据基本相符。文献 [1] 报导 CW OICL 在 $P=1$ torr 时, $G \approx 3 \times 10^{-4} \text{cm}^{-1} \sim 5 \times 10^{-4} \text{cm}^{-1}$, 本文为 $2 \times 10^{-4} \text{cm}^{-1} \sim 8 \times 10^{-4} \text{cm}^{-1}$; $P=110$ torr 时, $G \approx 2.7 \times 10^{-4} \text{cm}^{-1}$ 本文的结果是 $3 \times 10^{-4} \text{cm}^{-1} \sim 3.5 \times 10^{-4} \text{cm}^{-1}$ 。说明了计算的可靠性, 而我们研究范围更为宽广。

参 考 文 献

- [1] N. G. Basov et al. *Soviet J. Quantum Electron*, 17(5)(1987), 588.
- [2] S. S. Penner, *Quantitative Molecular Spectroscopy and Gas Emissivities*, 26; G. A. Bird, *Molecular Gas Dynamics*, 215.
- [3] 庄琦等, 中国激光, 14(11)(1987), 646, A. I. Didyukov et al., *Soviet J. Quantum Electron*, 12(4)(1982), 299; G. E. Bush et al., *IEEE J. QE* - 17(6)(1984), 1128.
- [4] K. Watanabe et al., 5th GCL(1984), 181-186; D. David, 6th GCL, (1986), 170.

NUMERICAL MODELLING CALCULATION AND ANALYSIS OF GAIN COEFFICIENT FOR CW CHEMICAL OXYGEN IODINE LASERS

Chen Liyin, Chu Zexiang

Institute of Mechanics, Academia Sinica Beijing 100080

ABSTRACT The relation between components, pressure, flow velocity and gain coefficient of CW OICL is theoretically analyzed by using a simple model through digital computation. The operating region concerned is $[O_2^*]/[I_2] = 10 - 200$, $[O_2^*]/[O_2] = 2 - 9$, $P = 1 - 100$ torr, $U = 5 - 100 \text{m/s}$. The necessity of flow conservation equation for a CW OICL is detially discussed. It is shown that the available gain region will be enlarged proportionally to flow velocity while the peak gain value almost remains invariable when flow velocity is increased.

KEY WORDS CW oxygen-iodine chemical lasers, gain coefficient, flow velocity