

## شبیه‌سازی و تحلیل گونه‌های ناحیه تخلیه الکتریکی و محاسبه بهره مولکول اکسیژن یکتا در لیزرهای ید- اکسیژن الکتریکی

جواد خلیل زاده<sup>۱\*</sup>، جبار صیدی<sup>۲</sup>

۱- استادیار، ۲- دانشجوی دکتری دانشگاه جامع امام حسین (ع)

(دریافت: ۹۱/۰۹/۱۱، پذیرش: ۹۲/۰۲/۲۱)

### چکیده

در این مقاله، اثر دمای الکترون بر بهره مولکول اکسیژن یکتایی ( $O_2(a^1\Delta_g)$ ) به منظور تحلیل شرایط بهینه تخلیه در لیزرهای ید- اکسیژن الکتریکی به صورت نظری بررسی شده است. به این منظور، اشباع مولکول اکسیژن یکتا در اثر برخوردهای فوق الاستیک و جدایش  $O_2(a^1\Delta_g)$  در اثر برخورد الکترون، مورد توجه قرار گرفته است. معادلات نرخ با استفاده از تقریب دو جمله‌ای معادله بولتزمن حل شده‌اند. نتایج به دست آمده دلالت بر آن دارد که وقتی دمای منسوب به الکترون‌ها، به محدوده  $1/9-2/1$  الکترون‌ولت برسد، با حذف قسمت عمده اکسیژن اتمی در ناحیه تخلیه، بهره بیشینه اکسیژن یکتا در حدود ۴۵ درصد به دست می‌آید.

**کلیدواژه‌ها:** اکسیژن اتمی، لیزر ید- اکسیژن تخلیه الکتریکی، مولکول اکسیژن یکتا، معادله بولتزمن.

## Simulation and Analysis of Species in Electric Discharge Region and Calculation of Singlet Oxygen ( $O_2(A^1\Delta_g)$ ) Yield for an Electric Discharge Oxygen - Iodine Laser

J. Khalilzadeh<sup>\*</sup>, J. Saydi

Imam Hossein University

(Received: 1/12/2012; Accepted: 11/05/2013)

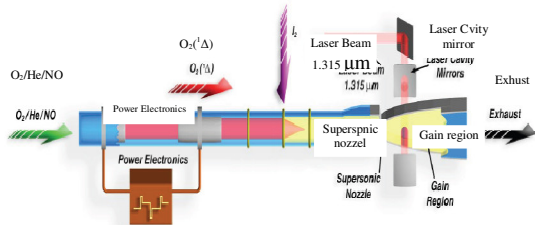
### Abstract

*In this paper, the effect of discharge region temperature on the yield of singlet oxygen ( $O_2(a^1\Delta_g)$ ) in an electric discharge oxygen iodine laser is theoretically studied to analyze optimum discharge conditions. This study, was done by considering the saturation of  $O_2(a^1\Delta_g)$  due to super-elastic electron collisions and  $O_2(a^1\Delta_g)$  dissociation by electron impact. Rate equations were solved using two terms approximation of Boltzmann equation. The results show that when the electron temperature was in the  $T_e= 1.9-2.1$  eV range, it causes removing the main part of the atomic oxygen  $O(^3P)$  from the discharge region, and the maximum yield of  $O_2(a^1\Delta_g)$  was obtained to be about 45%.*

**Keywords:** Atomic Oxygen, Electric Discharge Oxygen Iodine Laser, Singlet Oxygen Molecule, Boltzmann Equation.

## ۱. مقدمه

جهت تولید  $O_2(a^1\Delta_g)$ ، جستجوی روش های جایگزین تولید آن برای تغذیه لیزر ید-اکسیژن، منجر به توجه خاص روی لیزر ید-اکسیژن الکتريکی<sup>۵</sup> (EOIL) به دلیل جنبه های مثبت آن در مقایسه با نوع شیمیایی آن، شده است [۲ و ۱]. در این لیزرها که نمونه ای از ساختار آن در شکل (۱) ارائه شده است، بدون اینکه نیازی به سوخت های شیمیایی خطرناک وجود داشته باشد، اکسیژن یکتا با برخورد الکترونی در تخلیه الکتريکی تولید می شود [۹-۱]. بهره لیزرهای ید-اکسیژن الکتريکی به شدت و به طرز پیچیده ای به انرژی الکترون وابسته است. بنابراین بررسی وابستگی بهره به دمای الکترون ضروری است و باید با دقت تعیین شود. به همین دلیل مطالعه جزئیات جداسازی  $O_2(a^1\Delta_g)$  در اثر برخورد الکترون برای شبیه سازی صحیح پلاسما و واکنش های شیمیایی در بهره های بالای اکسیژن یکتا مورد نیاز است. مدل سازی محاسباتی سینتیک نواحی تخلیه الکتريکی و پشت آن، وسیله ای بی بدیل در توسعه DOIL بوده که امکان تحلیل تولید نمونه های مختلف تخلیه  $O_2(b^1\Sigma)$ ،  $O_2(a^1\Delta_g)$  و اتم های O و  $O_3$  و تعیین تأثیر نمونه های  $NO_x$  بر سینتیک سیستم را میسر می سازد [۵ و ۲].



شکل ۱. نمونه ای از اجزای اصلی EOIL فراصوتی [۲]

بهینه کردن بهره  $O_2(a^1\Delta_g)$  و بازده بر اساس نگرش انباشت یکنواخت انرژی انجام شده است که بهره  $O_2(a^1\Delta_g)$  به طور اساسی به انرژی ویژه ورودی بر مولکول اکسیژن وابسته است [۱۰]. همچنین برای افزایش بهره  $O_2(a^1\Delta_g)$  به مقداری بالاتر از بهره آستانه (۱۵ درصد در دمای ۳۰۰ کلوین) انرژی ویژه ورودی بالایی نیز مورد نیاز است. این اثر پایا در تخلیه های ناپایدار و در فشار بالا حتی با انرژی ورودی بهینه، قابل دستیابی نیست [۱۱]. در تخلیه های ناشی از پرتو الکترونی، ناپایداری های مختلف (نزدیکی الکترودها، چسبندگی-سوق و ...) منجر به میدان های الکتريکی غیریکنواخت می شود [۱۲]. لازم به ذکر است که با افزایش انرژی ورودی و فشار اکسیژن به ناحیه تخلیه، اشباع سریع در غلظت  $O_2(a^1\Delta_g)$  مشاهده می شود [۱۳]. همچنین  $O(^3P)$  پاسخی واضح برای اشباع فرونشانی سریع مولکول اکسیژن یکتا با استفاده از اتم های اکسیژن است. بنابراین اگر بتوان مولکول اکسیژن یکتا را حفظ و اکسیژن اتمی را حذف کرد، دستیابی به بهره بالا در این نوع لیزرها امکان پذیر خواهد بود.

لیزر ید-اکسیژن شیمیایی<sup>۱</sup> (COIL) که اولین بار در سال ۱۹۷۸ گزارش شد [۱]، و لیزر ید-اکسیژن تخلیه الکتريکی<sup>۲</sup> (DOIL) که اولین بار در سال ۲۰۰۵ معرفی شد [۲]، لیزرهایی هستند که در گذار دوقطبی مغناطیسی  $I(^2P_{1/2}) \rightarrow I(^2P_{3/2})$  ید اتمی با طول موج  $1/315\mu m$  فروسرخ نزدیک گسیل می کنند [۵-۱]. این ویژگی به اثرگذاری مفید لیزرهای ید-اکسیژن (به ویژه در مقایسه با لیزرهای پر قدرت طول موج بلند مانند  $CO_2$ ) بر فلزات منجر شده و توان مورد نیاز برای انواع عملیات ساخت مانند جوشکاری و برش کاری از یک سو و تخریب تسلیحات از سوی دیگر را کاهش می دهد. طول موج کوتاه به دلیل حد پراش پایین می تواند اندازه لکه پرتو کوچک تری را تولید نماید، موجب واگرایی کمتری شده و نیز به فیبرهای نوری با انعطاف پذیری بالا انتقال یابد که بدین ترتیب، ضمن امکان انتشار در مسیر طولانی تر، پرداخت و براده برداری با دقت زیاد و نیل به صافی سطح مناسب تر را فراهم کند [۳].

چون اتمسفر برای طول موج لیزرهای ید-اکسیژن (اعم از نوع شیمیایی و الکتريکی) در کنار لیزرهای دوتریوم فلوراید و هیدروژن فلوراید شفافیت خوبی دارد که عمق نفوذ بالایی را برای آنها تأمین می کند [۲]، و همچنین این لیزرها در رژیم پیوسته کار می کنند، بنابراین با توجهی خاص به عنوان لیزرهای قدرت (که نوع شیمیایی در کلاس مگاوات و الکتريکی در حد تکاملی چند صد وات قابل دسترسی هستند) در امور دفاعی مورد استفاده هستند. در کشورهای توسعه یافته، پروژه های متعددی برای توسعه این لیزرها و برنامه های سنگینی برای به کارگیری آنها در حال اجرا است. از جمله می توان به پروژه های لیزر هواپایه<sup>۳</sup> (ABL) [۱ و ۲] و لیزر تاکتیکی پیشرفته<sup>۴</sup> (ATL) ایالات متحده اشاره کرد. ABL در اوایل دهه ۱۹۹۰ با ۳/۱ میلیارد دلار بودجه بر مبنای منبع لیزری COIL برای دفاع موشکی بالیستیک تاکتیکی و قاره پیما، در مرحله روشن شدن موتور آنها، شروع شده و در فوریه ۲۰۱۰ اولین انهدام یک موشک بالیستیک به صورت هوا به هوا را با موفقیت پشت سر گذاشته است. یکی از اهداف ATL در سال ۲۰۰۹، ساخت یک لیزر هواپایه ارتفاع پایین برای اهداف زمینی مانند وسایل نقلیه بوده است [۲ و ۱]. تطابق طیفی طول موج این لیزرها با پنجره های اتمسفری و قابلیت کاربری نظامی آنها از نقطه نظر پدافند غیرعامل حائز اهمیت است [۶].

بازده مؤثر لیزرهای ید-اکسیژن به شدت به وجود مولکول اکسیژن یکتا  $O_2(a^1\Delta_g)$  وابسته است. به تازگی به خاطر بعضی از مشکلات مرتبط با ایمنی و لجستیک مواد شیمیایی مورد استفاده در COIL (به طور عمده هیدروژن پروکساید چگال و گاز کلرین)

<sup>1</sup> Chemical Oxygen Iodine Laser

<sup>2</sup> Discharge Oxygen Iodine Laser

<sup>3</sup> Air Born Laser

<sup>4</sup> Advanced Tactical Laser

<sup>5</sup> Discharge Oxygen Iodine Laser

## ۲. مدل و روش

$$\beta_1 = \Gamma \left( \frac{5}{2g} \right)^{\frac{3}{2}} \Gamma \left( \frac{3}{2g} \right)^{-\frac{5}{2}}, \quad (11)$$

$$\beta_2 = \Gamma \left( \frac{5}{2g} \right) \Gamma \left( \frac{3}{2g} \right)^{-1}, \quad 1 \leq g \leq 2.$$

در معادله (۱۰)،  $\phi$  انرژی متوسط الکترون است و S در معادله (۱) بیانگر اتلاف انرژی در اثر برخوردهای غیرالاستیک می‌باشد. جمله چشمه (S) خود به چهار جزء تجزیه می‌شود که به شرح زیر است:

$$S = \sum_{k=\text{inelastic}} C_k - \gamma \lambda \varepsilon^2 f \quad (12)$$

$$C_{k=\text{excitation}} = -\gamma x_k [\varepsilon \sigma_k(\varepsilon) f(\varepsilon) - (\varepsilon + \Delta \varepsilon_k) \sigma_k(\varepsilon + \Delta \varepsilon_k) f(\varepsilon + \Delta \varepsilon_k)] \quad (13)$$

$$C_{k=\text{attachment}} = -\gamma x_k \varepsilon \sigma_k(\varepsilon) f(\varepsilon) \quad (14)$$

$$C_{k=\text{ionization}} = -\gamma x_k [\varepsilon \sigma_k(\varepsilon) f(\varepsilon) - (\varepsilon + \Delta \varepsilon_k) \sigma_k(\varepsilon + \Delta \varepsilon_k) f(\varepsilon + \Delta \varepsilon_k)] + \delta \gamma x_k \int_0^\infty u \sigma_k(u) f(u) du \quad (15)$$

$x_k$  و  $\sigma_k$  به ترتیب کسر مولی گونه‌های هدف و سطح مقطع برخورد در واکنش کام می‌باشند.  $\Delta \varepsilon_k$  اتلاف انرژی در اثر برخورد کام،  $\delta$  تابع دلتا در  $\varepsilon = 0$ ، و  $\gamma$  ضریب بهنجار آن است:

$$\int_0^\infty f \varepsilon^{\frac{1}{2}} d\varepsilon = 1. \quad (16)$$

ضرایب نرخ براساس تابع توزیع انرژی الکترون با رابطه (۱۷) محاسبه می‌شود:

$$k_k = \gamma \int_0^\infty \varepsilon \sigma_k(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \quad (17)$$

نرخ واکنش‌ها در فرآیندهای برخوردی k با حاصل ضرب چگالی الکترون‌ها و گونه‌های هدف به دست می‌آید.

$$R_e = \sum_{j=1}^M x_j k_j N_n n_e \quad (18)$$

$x_j$  و  $k_j$  به ترتیب کسر مولی گونه‌های هدف و ضریب نرخ ( $m^3/s$ ) برای واکنش زام می‌باشند.  $M$  و  $N_n$  به ترتیب چگالی عددی حالت خنثی کل ( $m^{-3}$ ) و تعداد واکنش‌ها می‌باشند.

در این پژوهش، معادله دوجمله‌ای بولتزمن برای گونه‌های مختلف گاز اکسیژن با اجرای نرم‌افزار COMSOL حل شده است. این نرم‌افزار یک مجموعه کامل شبیه‌سازی قدرتمند است که می‌تواند معادلات دیفرانسیل سیستم‌های غیرخطی را توسط مشتقات جزئی روش المان محدود در فضاهای یک، دو و سه بعدی حل نماید. این نرم‌افزار می‌تواند در حضور عواملی نظیر میدان‌های الکترومغناطیسی، کشش، دینامیک سیالات و دینامیک گاز جریان سیال، انتقال حرارت، انتقال جرم و راکتورهای شیمیایی به خوبی راهگشا باشد. این نرم‌افزار همچنین فرصتی برای حل مسئله به صورت یک فرمول ریاضی (در فرم معادلات) و فیزیکی (انتخاب مدل فیزیکی، مثلاً مدل فرایند انتشار) را به استفاده کننده می‌دهد.

با حل معادلات ذکر شده برای گونه‌های تولید شده در ناحیه

مدل‌های سیالی تخلیه گازها، انتقال الکترون‌ها، یون‌ها و سایر گونه‌های واکنش‌پذیر و حل لحظه‌ای معادله بر اساس اصول و معادلات اساسی که شامل ۱- پیوستگی، ۲- تکانه، که معمولاً با معادله پخش تخمین زده می‌شود و ۳- انرژی که تنها برای الکترون‌ها است به صورت زیر توصیف می‌شوند. هر یک از این معادلات دربرگیرنده ضرایب انتقال یا ضرایب نرخ می‌باشند که بیانگر اثر برخوردها و داده‌های ورودی برای مدل سیالی هستند. ضرایب انتقال و نرخ فقط برای شرایط تخلیه مشخص شده‌اند، به‌ویژه این ضرایب به تابع توزیع انرژی الکترون وابسته است، که در حالت کلی ماکسولی نبوده و به شرایط بستگی دارد. در حالت کلی، تابع توزیع انرژی الکترون و ضرایب الکترون برای شرایط معین تخلیه، براساس داده‌های سطح مقطع برخورد الکترون با حل معادله بولتزمن برای الکترون قابل محاسبه است [۱۴]. معادله دوجمله‌ای بولتزمن، جواب تابع توزیع انرژی الکترون برای فرم‌های ویژه از گونه‌ها و سیالات را به دست می‌آورد. تخمین دوجمله‌ای بولتزمن به شرح زیر است:

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon} (Wf - D \frac{\partial f}{\partial \varepsilon}) = S \quad (1)$$

که W و D عبارتند از:

$$W = -\gamma \varepsilon^2 \sigma_e - 3a \left( \frac{n_e}{N_n} \right) A_1 \quad (2)$$

$$D = \frac{\gamma}{3} \left( \frac{E}{N_n} \right)^2 \left( \frac{e}{\sigma_m} \right) + \frac{\gamma k_B T}{q} \varepsilon^2 \sigma_e + 2a \left( \frac{n_e}{N_n} \right) (A_2 + \varepsilon^3 A_3) \quad (3)$$

$$\sigma_\varepsilon = \sum_{k=\text{elastic}} 2x_k \sigma_k \left( \frac{m_e}{M} \right) \quad (4)$$

$$a = \frac{q^2 \gamma}{24\pi \varepsilon_0^2} \ln \Lambda \quad \text{and} \quad \Lambda = \frac{12\pi \left( \frac{2\varepsilon_0 q E}{3} \right)^{\frac{3}{2}}}{q^3 n_e^{\frac{1}{2}}} \quad (5)$$

$$A_1 = \int_0^\varepsilon u^2 f(u) du \quad (6)$$

$$\sigma_m = \sum_{k=\text{all}} x_k \sigma_k \quad (7)$$

$$A_2 = \int_0^\varepsilon u^3 f(u) du \quad (8)$$

$$A_3 = \int_\varepsilon^\infty f(u) du \quad (9)$$

در معادلات بالا f و S به ترتیب نمادهای تابع توزیع انرژی الکترون (برحسب  $eV^{-3/2}$ ) و جمله چشمه هستند.  $\sigma_e$  سطح مقطع برخورد الاستیک کل (متر مربع)،  $\sigma_m$  سطح مقطع برخورد کل (متر مربع)،  $\varepsilon$  انرژی (الکترون ولت)، T دمای زمینه گاز (کلوین)،  $k_B$  ثابت بولتزمن (ژول بر کلوین)،  $n_e$  چگالی الکترون (بر مترمکعب) و  $N_n$  چگالی گاز زمینه (بر متر مکعب)، E میدان الکتریکی کاهش یافته، تابع f(u) تابع توزیع انرژی الکترون و  $\gamma = 2q/m_e^{1/2}$  می‌باشند. با حل تقریب دوجمله‌ای بولتزمن تابع توزیع انرژی الکترون  $f(\varepsilon)$  به صورت زیر است:

$$f(\varepsilon) = g \phi^{-3/2} \beta_1 \exp \left( - \left( \frac{\varepsilon \beta_2}{\phi} \right)^{\beta_3} \right) \quad (10)$$

که پارامترهای آن به صورت زیر تعریف می‌شوند:

تفکیک و حذف این نوع مولکول می شود، به صورت صعودی افزایش می یابد. شکل (۳) بیانگر این مطلب است که بهره بیشینه در دمای بین ۱۹ تا ۲۱ الکترون ولت از انرژی الکترون حاصل شده و مقدار آن حدود ۴۵ درصد است. بنابراین با توجه به شکل (۳) نتیجه گرفته می شود که در دمای بالاتر از محدوده دمایی متناظر با بهره بیشینه، بهره مولکول اکسیژن به دو دلیل کاهش می یابد زیرا اولاً واکنش های عامل حذف کننده مولکول اکسیژن یکتا در نظر گرفته شده اند و دوماً با افزایش انرژی الکترون، سطح مقطع برخورد الکترون ها کاهش می یابد. بنابراین بهره بیشینه، جایی بین این دو حالت است که در شکل های (۳ و ۲) نشان داده شده است.

لحاظ کردن واکنش های اضافه در این کار نسبت به کار [۹]، که تنها با احتساب واکنش های (۲۳-۲۰) برای دو حالت با حضور معادلات (۲۳ و ۲۲) و بدون حضور آنها بازده را محاسبه کرده بود، و نتایج آن در منحنی شکل (۴) ارائه شده است، باعث زیاد شدن چشمگیر بازده نسبت به آن شده است. ملاحظه می شود که جهت دستیابی به بهره بیشتر مولکول اکسیژن یکتا، در نظر گرفتن واکنش های (۲۴-۲۷) نقش مهمی دارد که نتیجه آن در منحنی شکل های (۳ و ۲) مشاهده می شود.

بهره بیشینه در شکل (۴) تقریباً ۲۵ درصد است در حالی که در کار محاسباتی حاضر، بهره حدود ۴۵ درصد (شکل ۳) حاصل شده است. همچنین بهره مولکول اکسیژن یکتا بدون در نظر گرفتن واکنش های حذف کننده مولکول اکسیژن یکتا در کار [۹] (شکل ۴) حدود ۴۰ درصد بوده اما در این کار این میزان به ۷۸ درصد (شکل ۲) بهبود یافته است. با توجه به تعریف بهره در معادله (۱۹) این افزایش در صورتی امکان دارد که ضرایب نرخ واکنش ها طوری تغییر نمایند که حاصل معادله افزایشی باشد. براساس رابطه (۱۷) نرخ هریک از واکنش ها به سه کمیت انرژی الکترونی (تابعی افزایشی برحسب انرژی)، سطح مقطع برخورد (تابعی کاهشی به صورت  $(\frac{E}{T_e})^{-0.5} \exp(-\frac{E}{T_e})$ ) و تابع توزیع الکترونی (مطابق معادله (۱۰) تابعی کاهشی با انرژی) بستگی دارد. بنابراین می توان افزایش بازدهی را به این تغییرات در ضرایب نرخ نسبت داد. دلیل دیگر بهبود قابل توجه بازده با لحاظ کردن واکنش های (۲۴-۲۷)، می تواند مربوط به بهبود تابع توزیع انرژی الکترونی باشد که توسط مولکول های جدید معرفی شده با این واکنش ها حاصل می شود. از نظر فیزیکی به نظر می رسد افزودن معادلات (۲۴-۲۷) اگر چه به طور مستقیم در تولید اکسیژن یکتا نقشی ندارد، اما دوبره دو (۲۴) با ۲۵ و ۲۶ با ۲۷) با اضافه کردن چرخه های تأخیری برای بازیافت اکسیژن، در نهایت اکسیژن مولکولی اضافه تری را به طور مجدد در معرض برخورد الکترونی و تولید اکسیژن یکتا (واکنش (۲۰) قرار داده و موجب افزایش بهره می شود. البته به دلیل لحاظ نکردن برخی عوامل مقابله کننده با این فرایندها، که در عمل وجود دارند، این افزایش تا حدودی غیرطبیعی به نظر می رسد. بنابراین اگرچه این کار گامی به جلو در جهت نمایان کردن نقش مثبت

تخلیه الکتریکی، بهره بیشینه برای مولکول اکسیژن یکتا که یکی از مهم ترین گونه ها در این نوع لیزرها می باشد، محاسبه شده است. مولکول اکسیژن یکتا به عنوان چشمه اصلی دمش بد لیزری در لیزرهای ید-اکسیژن الکتریکی عمل می کند. بهره مولکول اکسیژن یکتا به شرح زیر محاسبه می شود [۱۵ و ۱۴].

$$Y_{\max} \equiv [O_2(a^1\Delta_g)] / ([O_2(a^1\Delta_g)] + [O_2(^3X)] + [O_2(b^1\Sigma)] + [O])$$

$$= k_1 / (k_1 + k_{-1} + k_2 + k_3 + k_4 + k_{-4} + k_5 + k_{-5}) \quad (19)$$

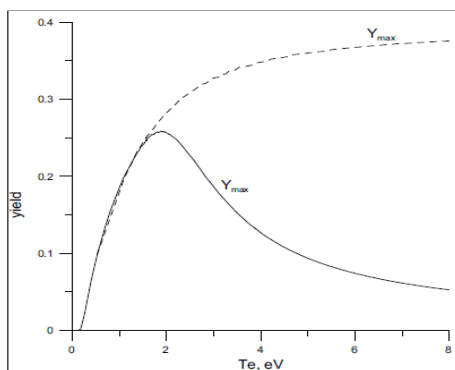
که در این رابطه  $k_1$  ثابت نرخ برای واکنش های زیر است:



نرم افزار ذکر شده با تعریف انواع واکنش ها، وارد کردن گونه های مولکولی، ضریب نرخ های واکنش، و تعریف دمای محیط واکنش، نرخ بهره یکی از گونه ها را مشابه رابطه (۱۹) محاسبه می کند. هدف این پژوهش، برآورد بهره گونه اکسیژن یکتا بوده است. با در نظر گرفتن رابطه (۱۹) و این فرض که دمای گاز ۳۰۰ کلوین باشد، تقریب دوجمله ای معادله بولتزمن برای اکسیژن خالص با شرایط: ۱- بدون در نظر گرفتن واکنش های (۲۲ و ۲۳)، ۲- با در نظر گرفتن همه واکنش ها حل شده است. نرم افزار با استفاده از بانک داده خود و حل تابع توزیع انرژی الکترون از معادله دوجمله ای بولتزمن، به طور خودکار ضرایب نرخ این واکنش ها را محاسبه و مورد استفاده قرار می دهد.

### ۳. نتایج و بحث

نتایج به صورت منحنی تغییرات بهره برحسب دمای الکترون در شکل های (۲ و ۳) نشان داده شده است. بهره بیشینه  $Y_{\max}$  به صورت تابعی از دمای الکترون برای حالت اول (که واکنش های (۲۲ و ۲۳) نادیده گرفته شده اند) در شکل (۲) نشان داده شده است. در شکل (۳) بهره بیشینه به صورت تابعی از انرژی الکترون برای حالتی که تمام واکنش های (۲۰-۲۷) حفظ شده باشند، ارائه شده است. در شکل (۲) دیده می شود که بهره بیشینه با افزایش دمای الکترون افزایش می یابد. این نتیجه حاکی از این حقیقت است که واکنش های (۲۳ و ۲۲) که در حذف مولکول اکسیژن یکتا دخیل هستند در نظر گرفته نشده اند. همچنین رشد مولکول اکسیژن یکتا تا حدود ۸۰ درصد بدون در نظر گرفتن واکنش هایی که منجر به



شکل ۴. بهره بیشینه مولکول اکسیژن یکتا  $O_2(a^1\Delta_g)$  برحسب دمای الکترون  $T_e$  با در نظر گرفتن واکنش‌های (۲۲-۲۳) (منحنی پیوسته) و بدون در نظر گرفتن عوامل حذف‌کننده و تفکیک‌کننده مولکول اکسیژن یکتای واکنش‌های (۲۲ و ۲۳) (منحنی خط‌چین) [۱۵]

#### ۴. نتیجه‌گیری

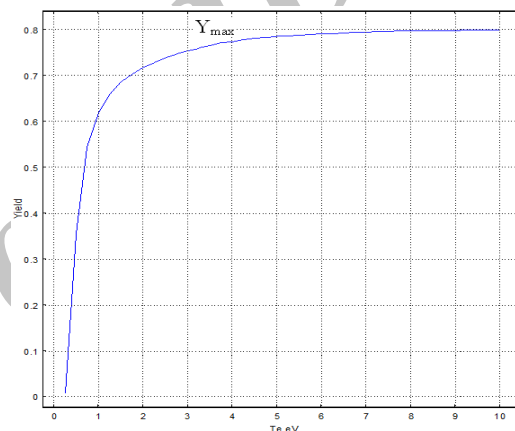
با توجه به معادله تقریب دوجمله‌ای بولتزمن، معادلات نرخ برای مولکول اکسیژن خالص در ناحیه تخلیه الکتریکی به‌منظور حفظ مولکول اکسیژن یکتای تولید شده در این ناحیه و همچنین دستیابی به بهره بیشینه حل شده است. دو حالت متفاوت حضور و عدم حضور عوامل حذف‌کننده مولکول اکسیژن یکتا نیز مورد بررسی قرار گرفته است. واکنش‌های شیمیایی اصلی در ناحیه تخلیه در نظر گرفته شده و معادلات مرتبط با آنها در شبیه‌سازی به‌کار گرفته شده است. لازم به ذکر است که نتایج به‌دست آمده از دقت بالایی برخوردار می‌باشد. همچنین در تحقیق حاضر به بهره بیشینه ۴۵ درصدی برای دمای الکترون بین  $1/9$  و  $2/1$  الکترون‌ولت رسیده شده که در مقایسه با کارهای مشابه افزایش قابل ملاحظه‌ای دارد. کاهش بهره در محدوده فراتر از این دما، به‌خاطر واکنش‌های حذف‌کننده مولکول اکسیژن یکتا است و سطح مقطع نیز در معادله بهره دارای وابستگی ماکسولی به دما  $T$  می‌باشد. انحنای منحنی، این کاهش را به‌صورت رابطه‌نمایی نشان می‌دهد.

#### ۵. مراجع

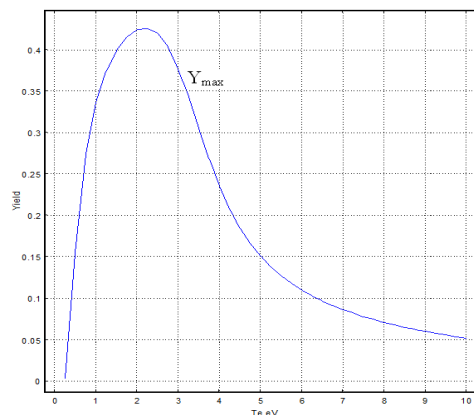
- [1] Bruzese, M. S. "Development of an Electric Discharge Oxygen-Iodine Laser"; PhD Thesis, Ohio State Univ., 2011.
- [2] Carroll, D. L. "Overview of High Energy Lasers: Past, Present, and Future"; In Proc. of 42<sup>nd</sup> AIAA Plasmadynamics and Laser Conf., 2011, 3102.
- [3] Velázquez-García, L. F.; Hill, T. F.; Wilhite, B. A.; Jensen, K. F.; Epstein, A. H.; Livermore, C. "A Mems Singlet Oxygen Generator—Part II: Experimental Exploration of the Performance Space"; Sixth Int. Workshop on Micro and Nanotechnology for Power Generation and Energy Conversion Applications, Nov. 29 - Dec. 1, 2006, Berkeley, U.S.A.
- [4] [4] Pickova, I.; Schmiedberger, J.; Jirasek, V.; Censky, M. "Generation of Atomic Iodine in RF Discharge for DOIL (Discharge Oxygen Iodine Laser)"; Acta Physica Universitatis Comenianae; 2009-2010, 105-109.

واکنش‌های مزبور بوده و بیانگر ضرورت تقویت شرایط رقابت به نفع آنها است، اما در یک سیستم واقعی سایر فرایندها را نمی‌توان نادیده گرفت.

به‌همین دلیل مطالعه جزئیات جداسازی مولکول اکسیژن یکتا با برخورد الکترون، برای شبیه‌سازی درست پلاسما و واکنش شیمیایی ضروری است. بنابراین با حذف اکسیژن اتمی و حفظ مولکول اکسیژن یکتا، افزایش بهره حتمی است. از این‌رو جهت دستیابی به بهره بیشینه اکسیژن یکتا با توجه به محدودیت‌های نظری ضروری است تا میزان اکسیژن اتمی کاهش داده شده و علاوه بر آن توان ویژه ورودی تا رسیدن به حد اشباع بهره مولکول اکسیژن یکتا در اثر برخورد فوق‌الاستیک افزایش یابد.



شکل ۵. بهره بیشینه مولکول اکسیژن یکتا  $O_2(a^1\Delta_g)$  برحسب دمای الکترون  $T_e$  بدون در نظر گرفتن عوامل حذف‌کننده و تفکیک‌کننده مولکول اکسیژن یکتا (واکنش‌های ۲۲ و ۲۳)



شکل ۶. بهره محاسباتی مولکول اکسیژن یکتا به‌صورت تابعی از دمای الکترون  $T_e$  با در نظر گرفتن همه واکنش‌ها (اعم از واکنش‌های حذف‌کننده و یا مولد مولکول اکسیژن یکتا)

- [11] Vasiljeva, A. N.; Klopovskiy, È. S.; Kovalev, A. S.; Lopaev, D. V.; Mankelevich, Y. A.; Popov, N. A.; Rakhimov, A. T.; Rakhimova, T. V. "On the Possibility of  $O_2(a^1\Delta_g)$  Production by a Non-Self-Sustained Discharge for Oxygen-Iodine Laser Pumping"; *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2004, 37, 2455.
- [12] Ionin, A. A.; Klimachev, Y. M.; Kotkov, A. A.; Kochetov, I. V.; Napartovich, A. P.; Seleznev, A. V.; Sinitsyn, D. V.; Hager, G. D. "Non-Self-Sustained Electric Discharge in Oxygen Gas Mixtures: Singlet Delta Oxygen Production"; *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2003, 36, 982.
- [13] Braginskiy, O. V.; Vasilieva A. N.; Klopovskiy, È. S.; Kovalev, A. S.; Lopaev, D. V.; Proshina O. V.; Rakhimova, T. V.; Rakhimov, T. "Singlet Oxygen Generation in  $O_2$  Flow Excited by RF Discharge: I. Homogeneous Discharge Mode: A-Mode"; *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2005, 38, 3609.
- [14] Hagelaar, G. J. M.; Pitchford, L. C. "Solving the Boltzmann Equation to Obtain Electron Transport Coefficients and Rate Coefficients for Fluid Models"; *Plasma Sources Sci. and Tech.* 2005, 14, 722-733.
- [15] Proshina, O. V.; Rakhimova, T. V.; Braginsky, O. V.; Kovalev, A. S.; Lopaev, D. V.; Mankelevich, Yu. A.; Rakhimov, A. T.; Vasilieva, A. N. "Discharge Singlet Oxygen Generator for Oxygen-Iodine Laser: II. Two-Dimensional Modeling of Flow Oxygen RF Plasma at 13.56 and 81mHz Power Frequency"; *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2006, 39, 5191-5200.
- [5] Carroll, D. L.; Benavides, G. F.; Zimmerman, J. W.; Woodard, B. S.; Palla, A. D.; Day, M. T.; Verdeyen, J. T.; Solomon, W. C. "Evolution of the Electric Discharge Oxygen-Iodine Laser"; In *Proc. of XVIII Int. Symposium on Gas Flow, Chemical Lasers, and High Power Lasers*, 2010, 7751, 775108-1-10.
- [6] Saydi, J.; Askari, M.; Khalilzadeh, J. "Decrease of Atomic Oxygen Concentration by Injection of He/No<sub>2</sub> Combination in Discharge Oxygen Iodine Lasers"; 2011, 2, 43-50 (In Persian).
- [7] Kodymova, J.; Jirasek, V.; Schmiedberger, J.; Spalek, O.; Censky, M. "Research on Advanced Chemical and Discharge Oxygen-Iodine Lasers"; In *Proc. of SPIE 2009*, 7196, 719602-1-11.
- [8] Davis, S. J.; Rawlins, W. T.; Lee, S.; Silva, M. L.; Kessler, W. J.; Mulhall, P. A. "Advanced Diagnostics for COIL and DOIL"; In *Proc. of High Power Laser Ablation*, 2004, 5448.
- [9] Rawlins, W. T.; Lee, S.; Kessler, W. J.; Oakes, D. B.; Piper, L. G.; Davis, S. J. "The Electric Oxygen-Iodine Laser: Chemical Kinetics of  $O_2(A^1\Delta)$  Production and  $I(^2P_{1/2})$  Excitation in Microwave Discharge Systems"; *LASE 2006 High Energy Average Power Lasers and Intense Beam Appl.*, PSI-SR-1242.
- [10] Velikhov, E. P.; Klopovskiy, K. S.; Kovalev, A. S.; Osipov, A. P.; Persiantzev, I. G.; Pis'mennii, V. D.; Rakhimov, A. T.; Rakhimova, T. V. "Discharge Singlet Oxygen Generator for Oxygen-Iodine Laser: II. Two-Dimensional Modeling of Flow Oxygen RF Plasma at 13.56 and 81mHz Power Frequency" *Dokl. Acad. Nauk, USSR*, 1983, 273, 600 (In Russian).

Archive of SID