

КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДИССОЦИАЦИИ МОЛЕКУЛ I_2 В СРЕДЕ ХИМИЧЕСКОГО КИСЛОРОДНО-ЙОДНОГО ЛАЗЕРА

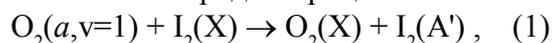
© 2006 В.Н. Аязов, С.Ю. Пичугин

Самарский филиал Физического института им. П.Н. Лебедева РАН

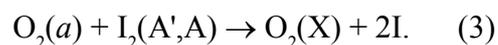
Разработана кинетическая модель диссоциации I_2 в среде химического кислородно-йодного лазера (ХКЛ) с учетом взаимодействия колебательно возбужденных молекул йода и синглетного кислорода. Результаты численных расчетов с использованием разработанной модели согласуются с экспериментальными данными по скорости диссоциации молекул йода в среде ХКЛ.

Молекулярный йод быстро диссоциирует в присутствии молекул синглетного кислорода $O_2(a)$. Механизм диссоциации еще не достаточно ясен. К настоящему времени предложено несколько каналов диссоциации I_2 . Каждый канал может внести свой вклад в процесс диссоциации.

Релаксация электронной энергии в активной среде химического кислородно-йодного лазера (ХКЛ) приводит к неравновесной заселенности колебательных уровней молекул кислорода и йода. В [1] было показано, что в активной среде ХКЛ образуются колебательно возбужденные молекулы синглетного кислорода на первом и втором колебательных уровнях. Генерация колебательных квантов молекул кислорода в активной среде ХКЛ осуществляется за счет релаксации электронной энергии молекул $O_2(a)$ в процессах с участием атомов йода в состоянии $^2P_{1/2}$ (обозначаемых далее I^*). При этом доля колебательно возбужденных молекул кислорода достигает нескольких десятков процентов [1]. Колебательно возбужденный кислород может играть важную роль в процессах формирования активной среды ХКЛ, особенно при диссоциации I_2 . В [2] было выдвинуто предположение, что электронные состояния $I_2(A)$ и $I_2(A')$ (рис. 1) являются промежуточными в процессе диссоциации йода. Они заселяются при столкновениях с колебательно возбужденными молекулами синглетного кислорода в процессах:



Диссоциация йода осуществляется при последующих столкновениях молекул $I_2(A)$ и $I_2(A')$ с молекулами $O_2(a)$:



Известно, что возбужденные атомы йода с большой скоростью тушатся молекулами $I_2(X)$: $I^* + I_2(X) \rightarrow I + I_2^*$ (константа скорости около $3 \cdot 10^{-11}$ см³/с). Вероятность колебательного возбуждения молекул $I_2(X)$ на уровни с $v \leq 45$ в этой реакции весьма велика [3]. Поэтому естественно ожидать, что в среде ХКЛ молекулы йода будут колебательно возбуждены в достаточно большой степени. В работах [3-4] экспериментально исследована заселенность колебательных уровней $I_2(X)$ в смесях, содержащих синглетный кислород. Было показано, что колебательные уровни молекул йода в таких средах существенно неравновесно заселены. Из диаграммы энергетических уровней O_2 и I_2 (рис. 1) видно, что суммарной электронной и колебательной энергии молекул синглетного кислорода, находящихся на колебательных уровнях с $v \geq 3$, достаточно для диссоциации молекул $I_2(X, v \geq 8)$. Аналогично, энергии молекул $O_2(a, v \geq 2)$ и $O_2(a, v \geq 1)$ достаточно для прямой диссоциации молекул $I_2(X)$, находящихся на колебательных уровнях с $v \geq 8$ и $v \geq 15$ соответственно. В связи с этим нами разработана модель механизма диссоциации I_2 , в которой наряду с процессами (1) – (3) дополнительно учитывается прямая диссоциация колебательно воз-

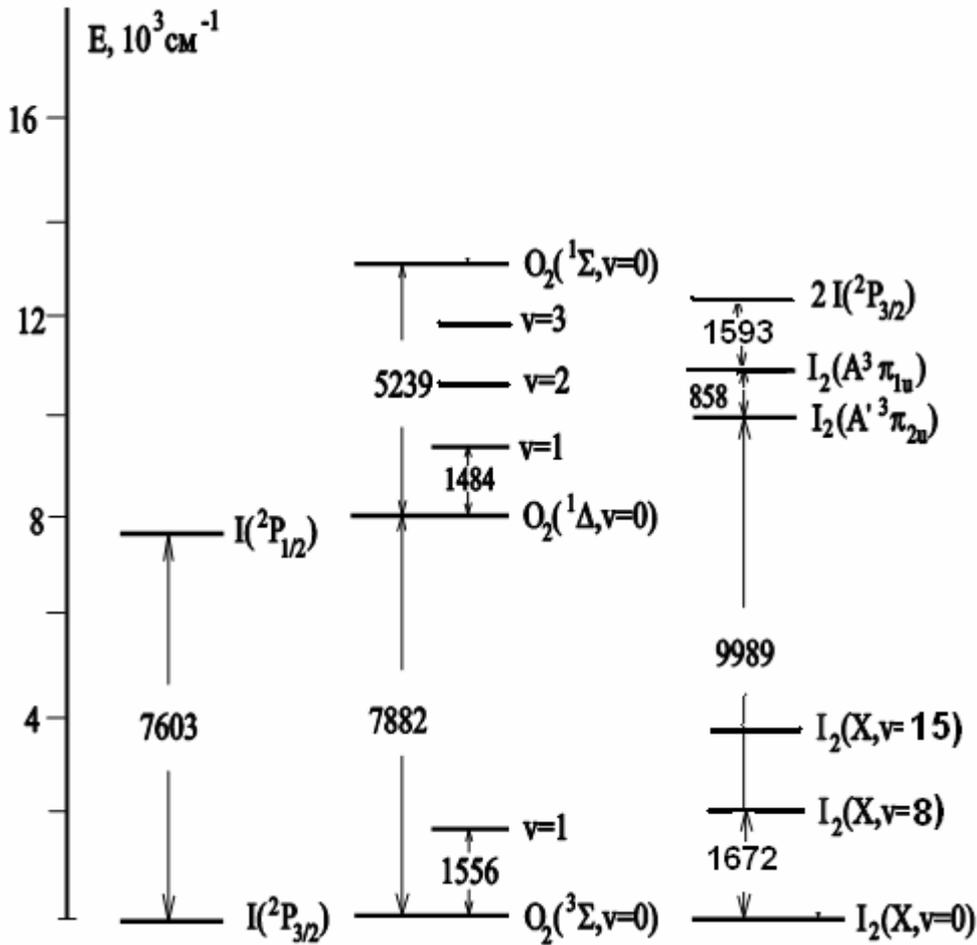
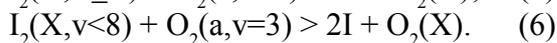
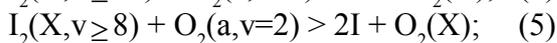
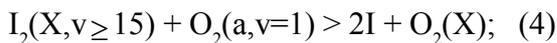


Рис. 1. Диаграмма нижних энергетических уровней атома I, молекул O₂ и I₂

бужденных молекул I₂(X, v) при столкновении с колебательно возбужденными молекулами синглетного кислорода, находящимися на первом, втором и третьем уровнях:



Мы предполагаем, что газовый поток на входе в лазерный реактор состоит из молекулярного кислорода в электронных состояниях X³Σ, a¹Δ, b¹Σ с концентрациями N_x, N_a, N_b, паров воды с концентрацией N_w и молекулярного йода в основном электронном состоянии I₂(X, ¹Σ с концентрацией N_{I2}. Рассматриваем поток с постоянным поперечным сечением в предположении мгновенного смешения. В разработанной модели уравнения, описывающие изменение относительных концентраций компонент (концентраций, деленных на концентрацию кислорода) и температуры потока, имеют следующий вид:

$$\frac{d\eta_a}{dx} = \frac{(N_{ox})_0}{U_0} \left(\frac{T_0}{T}\right)^2 (-2K_1\eta_a^2 - 2K_3\eta_a^2 -$$

$$- K_{44}\eta_a\eta_{I^*} - K_{40}\eta_a\eta_I + K_{41}\eta_X\eta_{I^*} +$$

$$+ K_5\eta_b\eta_w - K_{25}\eta_a\eta_A + K_{22}\eta_b\eta_{I2} + K_9\eta_b\eta_{CO2} -$$

$$- K_{34}\eta_{14}\eta_a - K_d\eta_{12}\eta_{a3} - K_{d1}\eta_{11}\eta_{a2} -$$

$$- K_{d3}\eta_{13}\eta_{a1} - K_{95}\eta_{a1}\eta_{I2} - K_{96}\eta_{a2}\eta_{I2} - K_{25}\eta_a\eta_A -$$

$$- K_{25}\eta_a\eta_A + K_{95}^-\eta_X\eta_A + K_{96}^-\eta_X\eta_A),$$

$$\frac{d\eta_b}{dx} = \frac{(N_{ox})_0}{U_0} \left(\frac{T_0}{T}\right)^2 (K_1\eta_a^2 + K_{44}\eta_a\eta_{I^*} - K_5\eta_b\eta_w -$$

$$- K_{21}\eta_b\eta_{I2} - K_{22}\eta_b\eta_{I2} - K_9\eta_b\eta_{CO2}),$$

$$\frac{d\eta_{I^*}}{dx} = \frac{(N_{ox})_0}{U_0} \left(\frac{T_0}{T}\right)^2 (-K_{44}\eta_a\eta_{I^*} + K_{40}\eta_a\eta_I -$$

$$- K_{41}\eta_X\eta_{I^*} - K_{43}\eta_X\eta_{I^*} - K_{33}\eta_{I2}\eta_{I^*} - K_{48}\eta_w\eta_{I^*}) ,$$

$$\frac{d\eta_{A'}}{dx} = \frac{(N_{ox})_0}{U_0} \left(\frac{T_0}{T}\right)^2 (K_{95}\eta_{a1}\eta_{I2} - K_{95}^-\eta_X\eta_{A'} - K_{25}\eta_a\eta_{A'} - K_{28}\eta_{A'}\eta_w - K_{29}^M\eta_{A'}\eta_M),$$

$$\frac{d\eta_A}{dx} = \frac{(N_{ox})_0}{U_0} \left(\frac{T_0}{T}\right)^2 (K_{96}\eta_{a2}\eta_{I2} - K_{96}^-\eta_X\eta_A - K_{25}\eta_a\eta_A - K_{28}\eta_A\eta_w - K_{29}^M\eta_A\eta_M),$$

$$\frac{d\eta_{I2}}{dx} = -\frac{(N_{ox})_0}{U_0} \left(\frac{T_0}{T}\right)^2 (K_{21}\eta_b\eta_{I2} + K_{28}(\eta_A + \eta_{A'})\eta_w + K_{29}(\eta_A + \eta_{A'})\eta_{N2} - K_{95}\eta_{a1}\eta_{I2} - K_{96}\eta_{a2}\eta_{I2} + K_{95}^-\eta_X\eta_{A'} + K_{96}^-\eta_X\eta_A + K_{34}\eta_{I4}\eta_a + K_d\eta_{I2}\eta_{a3} + K_{d1}\eta_{I1}\eta_{a2} + K_{d3}\eta_{I3}\eta_{a1}),$$

$$\frac{d\eta_1}{dx} = \frac{(N_{ox})_0}{U_0} \left(\frac{T_0}{T}\right)^2 (\gamma_{1,1}K_1\eta_a^2 + \gamma_{1,44}K_{44}\eta_a\eta_{I^*} + \gamma_{1,43}K_{43}\eta_X\eta_{I^*} - K_{95}\eta_{a1}\eta_{I2} + K_{95}^-\eta_X\eta_{A'} + \gamma_{1,5}K_5\eta_b\eta_w - K_{d3}\eta_{I3}\eta_{a1} + G_{VV}^1 + G_w^1),$$

$$\frac{d\eta_2}{dx} = \frac{(N_{ox})_0}{U_0} \left(\frac{T_0}{T}\right)^2 (\gamma_{2,1}K_1\eta_a^2 + \gamma_{2,44}K_{44}\eta_a\eta_{I^*} + \gamma_{2,43}K_{43}\eta_X\eta_{I^*} - K_{96}\eta_{a2}\eta_{I2} + K_{96}^-\eta_X\eta_A + \gamma_{2,5}K_5\eta_b\eta_w - K_{d1}\eta_{I1}\eta_{a2} + G_{VV}^2 + G_w^2),$$

$$\frac{d\eta_3}{dx} = \frac{(N_{ox})_0}{U_0} \left(\frac{T_0}{T}\right)^2 (\gamma_{3,5}K_5\eta_b\eta_w - K_d\eta_{I2}\eta_{a3} + G_{VV}^3 + G_w^3),$$

$$\frac{d\eta_4}{dx} = \frac{(N_{ox})_0}{U_0} \left(\frac{T_0}{T}\right)^2 (G_{VV}^4 + G_w^4),$$

$$\frac{d\eta_{w1}}{dx} = \frac{(N_{ox})_0}{U_0} \left(\frac{T_0}{T}\right)^2 \{\beta_{1,48}K_{48}\eta_w\eta_{I^*} + \beta_{1,5}K_5\eta_b\eta_w + K_{85}\eta_w\eta_w - K_{85}\eta_{w1} \exp(\Delta E / kT) - K_{94}\eta_{w1}\eta_w + K_{94}\eta_w^2 \exp(-E_w / kT)\},$$

$$\frac{dT}{dx} = \frac{(N_{ox})_0}{(C_p^{O2} + C_p^M)\eta_M U_0} \left(\frac{T_0}{T}\right)^2 (q_1K_1\eta_a^2 + q_{44}K_{44}\eta_a\eta_{I^*} + q_{43}K_{43}\eta_X\eta_{I^*} + q_5K_5\eta_b\eta_w + q_{33}K_{33}\eta_{I2}\eta_{I^*} + q_{48}K_{48}\eta_w\eta_{I^*} + q_{22}K_{22}\eta_b\eta_{I2} + q_{94}K_{94}\eta_{w1}\eta_w + q_{28}K_{28}\eta_w(\eta_A + \eta_{A'}) + q_{29}K_{29}^M(\eta_A + \eta_{A'})),$$

$$\frac{d\eta_{I1}}{dx} = \frac{(N_{ox})_0}{U_0} \left(\frac{T_0}{T}\right)^2 \{\gamma K_{33}\eta_{I2}\eta_{I^*} - (K_{10x} + K_{1w}\eta_w + K_{1M}\eta_M)(\eta_{I1} - \eta_{I3}) - K_{d1}\eta_{I1}\eta_{a2}\},$$

$$\frac{d\eta_{I3}}{dx} = \frac{(N_{ox})_0}{U_0} \left(\frac{T_0}{T}\right)^2 \{\gamma K_{33}\eta_{I2}\eta_{I^*} - (K_{30x} + K_{3w}\eta_w + K_{3M}\eta_M)(\eta_{I3} - \eta_{I4}) - K_{d3}\eta_{I3}\eta_{a1}\},$$

$$\frac{d\eta_{I4}}{dx} = \frac{(N_{ox})_0}{U_0} \left(\frac{T_0}{T}\right)^2 \{\gamma K_{33}\eta_{I2}\eta_{I^*} - (K_{35}\eta_X + K_{36}\eta_w + K_{38}\eta_M)\eta_{I4} - K_{34}\eta_{I4}\eta_a\}.$$

Здесь

$$\eta_{a1} = 1.1\eta_a\eta_1; \eta_{a2} = 1.15\eta_a\eta_2; \eta_{a3} = 1.2\eta_a\eta_3;$$

$$K_1 = 9.5 \times 10^{-28} T_{eff}^{3.8} \exp(700/T_{eff});$$

$$K_{44} = 4 \times 10^{-24} T_{eff}^{3.8} \exp(700/T_{eff});$$

$$T_{eff} = T^s T_v^{1-s};$$

$$T_v = \frac{E_1}{k \ln(1 + 1/\eta_v)};$$

$$\eta_v = \eta_1 + 2\eta_2 + 3\eta_3 + 4\eta_4,$$

s – параметр феноменологической модели Парка, в наших расчетах мы полагаем $s = 0,6$.

$$G_{VV}^1 = 2Q(0,2)\eta_0\eta_2 + Q(0,3)\eta_0\eta_3 + Q(2,2)\eta_2^2 - 2Q(1,1)\eta_1^2 - Q(2,1)\eta_1\eta_2 + Q(3,2)\eta_2\eta_3 - (Q(1,3) + Q(3,1))\eta_1\eta_3 + Q(0,4)\eta_0\eta_4 + Q(4,2)\eta_2\eta_4 - (Q(1,4) + Q(4,1))\eta_1\eta_4; G_{VV}^2 = Q(1,1)\eta_1^2 + 2Q(1,3)\eta_1\eta_3 + Q(0,3)\eta_0\eta_3 - 2Q(2,2)\eta_2^2 - Q(2,1)\eta_1\eta_2 - Q(3,2)\eta_2\eta_3 + Q(3,3)\eta_3^2 + Q(1,4)\eta_1\eta_4 + Q(4,3)\eta_3\eta_4 - (Q(4,2) + Q(2,4))\eta_2\eta_4 - Q(0,2)\eta_0\eta_2; G_{VV}^3 = Q(2,1)\eta_1\eta_2 + Q(2,2)\eta_2^2 - Q(0,3)\eta_0\eta_3 - (Q(1,3) + Q(3,1))\eta_1\eta_3 - Q(3,2)\eta_2\eta_3 - 2Q(3,3)\eta_3^2 + Q(0,4)\eta_0\eta_4 + 2Q(2,4)\eta_2\eta_4 +$$

$$\begin{aligned}
 & Q(1,4)\eta_1\eta_4 + Q(4,4)\eta_4^2 - Q(4,3)\eta_3\eta_4; \\
 & G_{VV}^4 = Q(3,2)\eta_2\eta_3 + Q(3,1)\eta_1\eta_3 + \\
 & Q(3,3)\eta_3^2 - Q(0,4)\eta_0\eta_4 - (Q(1,4) + \\
 & Q(4,1))\eta_1\eta_4 - (Q(4,2) + Q(2,4))\eta_2\eta_4 - \\
 & Q(4,3)\eta_3\eta_4 - Q(4,4)\eta_4^2; Q(I,J) - \text{константа} \\
 & \text{скорости } VV \text{ процесса } O_2(I) + O_2(J) > O_2(I- \\
 & I) + O_2(J+1); G_w^1 = K_{85}(\exp(161/T)\eta_0\eta_{w1} + \\
 & 1.3\eta_2\eta_w - (\exp(199/T) + 1.3)\eta_1\eta_{w1} - \eta_1\eta_w); \\
 & G_w^2 = K_{85}(\exp(199/T)\eta_1\eta_{w1} - 1.3\eta_2\eta_w); \\
 & G_w^3 = 1.2K_{85}(\exp(235/T)\eta_2\eta_{w1} - \eta_3\eta_w); \\
 & G_w^4 = K_{85}(\exp(270/T)\eta_3\eta_{w1} - \eta_4\eta_w).
 \end{aligned}$$

Индексы I^* , I обозначают атомы йода в электронных состояниях $^2P_{1/2}$ и $^2P_{3/2}$; A' и A – молекулы йода в электронных состояниях $A'^3\Pi_{2u}$ и $A^3\Pi_{1u}$; M – N_2 либо He или CO_2 ; 0 обозначает начальные значения. В приведенных уравнениях N_{ox} – концентрация молекул кислорода; U – скорость газового потока; q_j – энергетический эффект j -ой реакции; $C_p^{O_2}$, C_p^M – молярные теплоемкости O_2 и буферного газа M ($M = N_2, He, CO_2$); η_i – относительная концентрация молекул кислорода на i -ом колебательном уровне ($i=0,1,2,3,4$); η_{w1} – доля молекул $H_2O(010)$ в кислороде; $\gamma_{i,j}$ – вероятности возбуждения i -го колебательного уровня молекулы O_2 в j -ом; $\beta_{i,j}$ – среднее количество колебательных квантов изгибной моды молекул воды, возбуждаемых в j -ом процессе; $\Delta E = E_w - E_l$, E_w и E_l – колебательные энергии молекул $H_2O(010)$ и $O_2(a,x=1)$. Нумерация констант скоростей соответствует нумерации процессов в стандартном пакете кинетических процессов в ХКЛ [5]; кроме этого, номерами 38, 95 и 96 нами обозначены процессы $I_2(X, v \geq 23) + M > I_2(X, v < 23) + M$, $O_2(a, v=1) + I_2(X) \rightarrow O_2(X) + I_2(A')$ и $O_2(a, v=2) + I_2(X) \rightarrow O_2(X) + I_2(A)$ соответственно. В расчетах мы полагаем $K_{95} = 2 \cdot 10^{-12}$ см³/с, $K_{96} = 3 \cdot 10^{-11}$ см³/с.

В разработанной нами модели η_{11} , η_{13} и η_{14} обозначают относительные концентрации колебательно возбужденных молекул йода, находящихся на уровнях с $v \geq 8$, $v \geq 15$ и $v \geq 23$ соответственно; γ – вероятность образования в реакции $I^* + I_2(X) \rightarrow I + I_2(v)$ колебательно возбужденных молекул йода с $v \geq 23$; K_{10x}, K_{1w}, K_{1M} – эффективные константы скорости релаксации молекул йода с $8 \leq v \leq 14$ при столкновениях с молекулами O_2, H_2O и $M = N_2, He, CO_2$; K_{30x}, K_{3w}, K_{3M} – аналогичные константы скорости релаксации молекул йода с $15 \leq v \leq 22$; K_d, K_{d1}, K_{d3} – константы скорости диссоциации молекул йода в процессах (4), (5) и (6) соответственно. Мы предполагаем, что в процессе тушения I^* на $I_2(X)$ молекулы $I_2(X, v)$ образуются только на уровнях с $v \geq 23$ [6], а заселение более нижних уровней происходит в ходе колебательной релаксации.

Для оценки значения γ воспользуемся данными работы [4]. Квазистационарная концентрация молекул $I_2(X, v \geq 23)$, очевидно, находится из условия равенства скорости образования таких молекул и скорости их убыли за счет процессов колебательной релаксации и диссоциации. Измеренная в [4] концентрация молекул $I_2(X, v \geq 23)$ составляла около 10^{12} см⁻³. Зная, что константа скорости диссоциации I_2 в процессе $I_2(X, v \geq 23) + O_2(a) > 2I + O_2(X)$ составляет $K_{34} = 3 \cdot 10^{-11}$ см³/с, находим с учетом условий эксперимента [4], что $\gamma \approx 0,05$. Для эффективных констант скорости колебательной релаксации молекул $I_2(X, v \geq 23)$ при столкновениях с молекулами O_2, H_2O и N_2 , берем следующие значения [6]: $K_{35} = 4 \cdot 10^{-12}$ см³/с, $K_{36} = 8 \cdot 10^{-12}$ см³/с, $K_{38} = 6 \cdot 10^{-12}$ см³/с. Полагаем в расчетах, что эффективные константы скорости релаксации молекул йода с $8 \leq v \leq 14$ и $15 \leq v \leq 22$ будут такими же: $K_{10x} = K_{30x} = K_{35}$, $K_{1w} = K_{3w} = K_{36}$, $K_{1M} = K_{3M} = K_{38}$.

Также полагаем, что $K_d = K_{d1} = K_{d3} = 3 \cdot 10^{-11} \text{ см}^3/\text{с}$. Кроме этого в расчетах для константы диссоциации I_2 при столкновениями с молекулами $O_2(^1\Sigma)$ мы берем значение $K_{21} = 3,3 \cdot 10^{-11} \text{ см}^3/\text{с}$ [7].

На рис. 2 представлены экспериментальные зависимости концентрации возбужденных атомов йода от расстояния вдоль потока при различных начальных значениях z_{12} в случае использования в качестве буферного газа азота в соотношении $N_2:O_2 = 1:1$ при $z_{a0} = 0,6$ и $z_w = 3\%$. Там же в виде сплошных кривых приведены результаты расчетов с использованием разработанной модели, а в виде пунктирных кривых – результаты расчетов без учета процессов (4) – (6). Как видно из рисунка 2 результаты расчетов с помощью используемой модели диссоциации йода дают хорошее согласие с экспериментальными данными и учет процессов (4) – (6) приводит к увеличению скорости диссоциации I_2 на начальном этапе. На рис. 3 приведены измеренные в экспериментах значения N_{I^*} на различных расстояниях вдоль потока для различных давлений буферного

газа – азота при $z_{12} = 0,94\%$. На этом же рисунке представлены результаты расчетов на основе используемой модели с приведенными выше параметрами. Видно, что расчетная скорость диссоциации молекул йода практически не зависит от давления буферного газа, что согласуется с экспериментальными данными.

Таким образом, в настоящей работе разработана кинетическая модель механизма диссоциации I_2 , в котором промежуточные состояния $I_2(A')$ или $I_2(A)$ заселяются при столкновениях с колебательно возбужденными молекулами $O_2(a, v=1 \text{ или } 2)$ и дополнительно учитывается прямая диссоциация колебательно возбужденных молекул йода при столкновении с колебательно возбужденными молекулами синглетного кислорода, находящимися на первом, втором и третьем уровнях. Результаты расчетов с помощью разработанной модели дают хорошее согласие с экспериментальными данными. При этом учет процессов $I_2(X, v) + O_2(a, v=1, 2, 3) > 2I + O_2(X)$ приводит к увеличению скорости диссоциации молекул йода, особенно на начальном этапе.

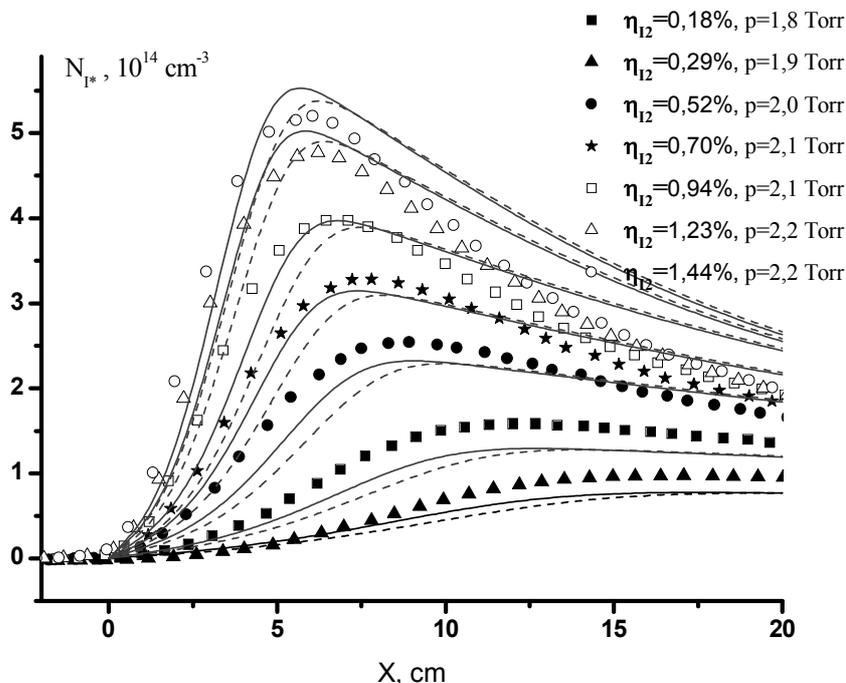


Рис. 2. Экспериментальные и расчетные зависимости концентрации возбужденных атомов йода от расстояния вдоль потока при различных начальных значениях z_{12} : Сплошных кривые – результаты расчетов с использованием разработанной модели; пунктирные кривые – результаты расчетов без учета процессов (4) – (6)

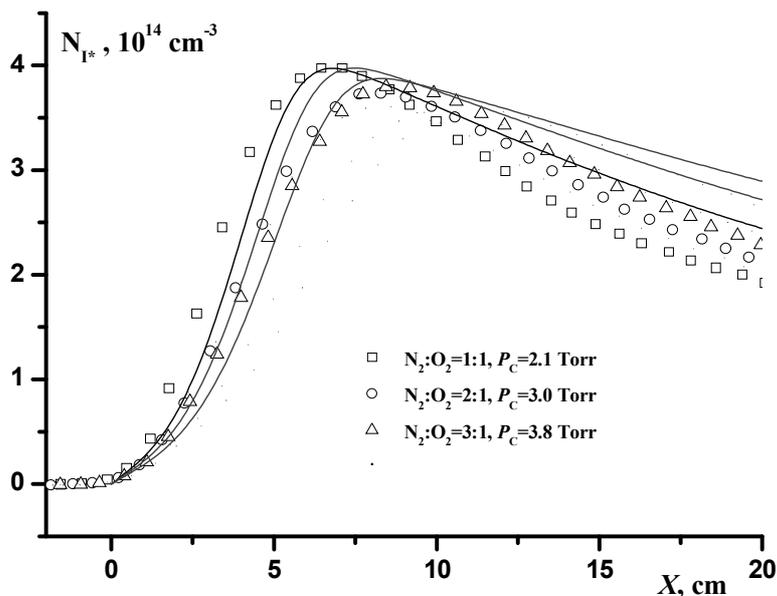


Рис. 3. Измеренные в экспериментах значения N_{I^*} на различных расстояниях вдоль потока для различных давлений буферного газа при $\alpha_{I_2} = 0,94\%$: сплошные кривые – результаты расчетов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Antonov I.O., Azyazov V.N., Pichugin S.Yu., Ufimtsev N.I. Detection of vibrationally excited O_2 in $O_2(a^1\Delta_g) - I$ mixture // Chem. Phys. Lett. 2003. V. 376.
2. Аязов В.Н., Пичугин С.Ю., Сафонов В.С., Уфимцев Н.И. Распределение молекул O_2 по колебательным уровнями на выходе генератора синглетного кислорода // Квантовая электроника. 2001. Т. 31.
3. Van Benthem M.H., Davis S.J. Detection of vibrationally excited I_2 in the iodine dissociation region of chemical oxygen-iodine lasers // J.Phys.Chem. 1986. V. 90.
4. Barnault B., Bouvier A.J., Pigache D., Bacis R. Absolute measurements of the $I_2(X)$ high vibrational levels in the oxygen-iodine reaction // Journal de Physique IV. 1991. V. 1.
5. Perram G.P. Approximate analytic solution for the dissociation of molecular iodine in the presence of singlet oxygen // Int. J. Chem. Kinet. 1995. V. 27.
6. Lawrence W.G., Van Marter T.A., Nowlin M.L., Heaven M.C. Inelastic collision dynamics of vibrationally excited I_2 // J.Chem.Phys. 1997. V. 106.
7. Han J., Komissarov A.V., Tinney S.P., Heaven M.C., Davis S.J., Lee S. Kinetics studies for advanced iodine laser concepts // Proc. SPIE. 2005. V. 5777.

KINETIC MODEL OF I_2 MOLECULES DISSOCIATION IN THE MEDIUM OF CHEMICAL OXYGEN IODINE LASER

© 2006 V.N. Azyazov, S.Yu. Pichugin

Samara Branch of Physics Institute named for P.N. Lebedev of Russian Academy of Sciences

Kinetic model of I_2 molecules dissociation in the medium of chemical oxygen iodine laser (COIL) taking into account interaction of the vibrationally excited iodine and singlet oxygen molecules is developed. The results of computer calculations utilizing this model are good agreement to experimental dissociation rate of iodine molecules in COIL medium.