

扩散型连续波 HF 化学激光器 小信号增益的计算

周学华 陈丽吟

(中国科学院力学研究所)

提要: 应用层流边界层二维简化模型计算了扩散型连续波 HF 化学激光器的小信号增益。研究了气流速度、温度、组份对增益的影响, 得到一些有用的结果。计算结果与二维 Navier-Stokes 方程组的计算结果相符, 但计算方法较简单。

Calculation of small signal gain for a diffusion-type CW HF chemical laser

Zhou Xuehua, Chen Liyin

(Institute of Mechanics, Academia Sinica)

Abstract; Using the simplified two-dimensional model, the small signal gain for a diffusion-type CW HF chemical laser is calculated. The effects of velocity, temperature, constituents on the gain are studied and some useful results obtained. The results agree with those obtained from two-dimensional Navier-Stokes equations. Our method is simpler and more practical.

一、引言

文献 [1, 2] 对连续波 HF 激光器进行了理论计算。文献 [1] 采用直接求解二维 Navier-Stokes 方程组的方法, 计算热流与冷流, 定常与非定常进口条件对二维增益分布等的影响。该模型较全面较好地模拟有激烈化学反应和弛豫过程的化学激光器流场分布和纵向、侧向压力分布, 但过程复杂, 计算量大。本文是文献 [3] 的继续, 用层流边界层

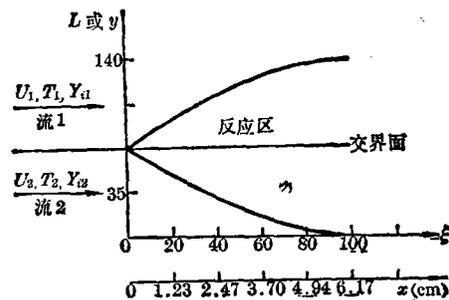


图1 平行流扩散混合化学
反应坐标示意图

收稿日期: 1984年12月19日。

二维简化模型(图1)进行详细计算。并将计算结果与文献[1]进行了比较。

二、计算公式

层流边界层公式 二维简化模型的详情已在文献[3]中描述。这里仅引用经坐标变换后简化的 Prandtl 二维边界层方程组:

Blasius 方程

$$f'''(\eta) + f(\eta)f'(\eta) = 0 \quad (1)$$

式中 $f'(\eta) = U/u_1$, $\eta = Z\sqrt{U_1/2\xi}$,

$$Z = \int_0^\eta \rho dy, \quad \xi = \int_0^x \rho \mu dx,$$

组份方程

$$\frac{\partial^2 Y_i}{\partial \eta^2} + f(\eta) \frac{\partial Y_i}{\partial \eta} - 2f'(\eta)\xi \frac{\partial Y_i}{\partial \xi} = -\frac{2\xi\omega_i M_i}{u_1 \rho^2 \mu} \quad (2)$$

($i=1, 8$)

能量方程

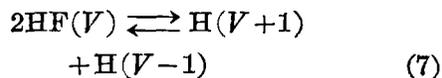
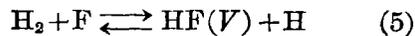
$$\frac{\partial^2 H_0}{\partial \eta^2} + f(\eta) \frac{\partial H_0}{\partial \eta} - 2f'(\eta)\xi \frac{\partial H_0}{\partial \xi} = \frac{2\xi M}{u_1 \rho^2 \mu} \sum h_i \omega_i \quad (3)$$

理想气体状态方程

$$\rho = P/(RT \sum Y_i/M_i) \quad (4)$$

式中 H_0 为总焓, M 、 μ 、 ρ 为混合物的分子量、粘性、密度, u_1 为平行流 1 的速度, ω_i 、 h_i 、 M_i 分别为组份 i 的化学反应速率, 生成热和分子量, Y_i 为组份 i 的质量分数。

H_2 与 F 的化学反应产生了振动激发态的 HF(V), 随后发生 HF(V) 的碰撞去活化的弛豫反应。本文仅考虑下列主要反应



式中 V 为振动量子数 $0 \sim 3$, M 为 H_2 、F、H。速率系数请参看文献[3]。

方程(1)~(4)结合化学反应方程, 用隐

式有限差分格式进行数值计算。求解浓度场分布, 继而求出对应的增益分布。

在低压混合区内, 存在的组元有 F、 H_2 、He、H、HF($V=0, 3$)。假定 HF(V), $V=0 \sim 3$ 各振动能级是相互独立的, 每个能级看作是一个独立的组元, 一共有 8 个独立组元; 因压力很低只考虑多普勒加宽以及考虑振转的 P 支跃迁。粒子数密度用 $n_{v,j}$ 表示时, 激活介质的小信号增益系数为^[4]

$$\alpha_{v,j} = \frac{8\pi^3 \nu}{3hc} S_j |M_{V+1}^v|^2 \times \left(\frac{n_{v+1,j-1}}{g_{v+1,j-1}} - \frac{n_{v,j}}{g_{v,j}} \right) \phi \quad (8)$$

式中 $\alpha_{v,j}$ 表示由振动能级 $V+1$ 跃迁到 V , 转动能级由 $J-1$ 跃迁到 J 的 P 支增益系数, ν 为跃迁频率, h 为普朗克常数, c 为光速。| M_{V+1}^v | 为振动跃迁的电偶极矩阵元,

表 1 分子参数与常数^[4]

W_0 (cm^{-1})	$W_0 X_0$ (cm^{-1})	B_0 (cm^{-1})	α_0 (cm^{-1})	
4140.0	90.0	20.95	0.796	
a (ergcm^3)	b (ergcm^3)	c (ergcm^3)	a_v	b_v
0.97637	0.0506	0.00103	-0.05	1.05

表 2 增益参数^[4]

跃迁波长(cm)	$\lambda = 1/(W_0 - 2W_0 X_0(V+1) - J(2B_0 + \alpha_0(J - 2(V+1))))$, 克分子光能(erg/mol)
$\epsilon_{v,j} = h\nu N_A = \frac{hc}{K} R\lambda_{v,j}^{-1}$	
振动跃迁矩阵元(erg·cm ³)	$ M_0^v ^2 = (a + bJ + cJ^2) \cdot 10^{-38}$
	$ M_{V+1}^v ^2 = (a_v + b_v(V+1)) M_0^v ^2$
中心频率处($\nu = \nu_0$) Doppler 线型因子(s)	$\phi = \frac{2}{\Delta\nu_D} \left(\frac{\ln 2}{\pi} \right)^{1/2} \Delta\nu_D = \frac{2}{\lambda} (2RT \ln 2 / M_{HF})^{1/2}$
分子振动能(cm^{-1})	$G_V = W_0 \left(V + \frac{1}{2} \right) - W_0 X_0 (V+1/2)^2$
转动能量(cm^{-1})	$E_{v,j} = J(J+1) B_V$
振动能级 V 的转动常数(cm^{-1})	$B_V = B_0 + \alpha_0(V+1/2)$
转动线强度	$S_j = J$ (在 P 支跃迁时)

$g_{v,j}$ 为给定振动态 V 时的转动权重, 等于 $2J+1$ 。 ϕ 为中心频率处多普勒线型因子。式中各参数表达式见表 1、表 2。转动粒子数密度服从玻尔兹曼分布

$$n_{v,j} = N_v \frac{g_{v,j}}{Q_{r,v}} \exp\left(-\frac{hc}{KT} E_{v,j}\right) \quad (9)$$

式中 N_v 为振动能级 V 的数密度, $Q_{r,v}$ 为转动配分函数, 其近似表达式为

$$Q_{r,v} = KT/(\sigma hc B_v) \quad (10)$$

式中 σ 为对称数, 对 HF 来说 $\sigma=1$, B_v 为转动常数。粒子数密度与质量分数的关系式为

$$N_v = \rho N_A Y_v / M_v \quad (11)$$

式中 N_A 为亚佛加德罗常数, Y_v 、 M_v 分别为 HF(V) 的质量分数和分子量。由式(8)、(9)、(11)得

$$\begin{aligned} \alpha_{v,j} &= \epsilon_{v,j} \rho (S_{v+1,j-1} Y_{v+1} - S_{v,j} Y_v) \\ &= A_{v,j} (Y_{v+1} - \beta_{v,j} Y_v) \end{aligned} \quad (12)$$

式中 $A_{v,j} = \epsilon_{v,j} \rho S_{v+1,j-1} / M_v$

$$\begin{aligned} S_{v+1,j-1} &= \frac{8\pi^3 \phi S_j}{3h^2 c Q_{r,v+1}} |M_v^{v+1}|^2 \\ &\quad \times \exp\left(-\frac{hc}{KT} E_{v+1,j-1}\right) \\ \beta_{v,j} &= \frac{S_{v,j}}{S_{v+1,j-1}} = \frac{Q_{r,v+1}}{Q_{r,v}} \\ &\quad \times \exp\left(\frac{hc}{KT} (E_{v+1,j-1} - E_{v,j})\right) \end{aligned}$$

上式表明了增益与激活粒子质量分数及其他热力学变量的关系, 是本文采用的计算公式。在计算中考虑了 HF($V=1, 3$) 的三个激发态, $J=1, 6$ 的六个转动能级。

每个半通道的积分增益为

$$G_{v,j} = \int_0^{y_0} \alpha_{v,j} dy \quad (13)$$

平均增益为

$$\bar{\alpha}_{v,j} = G_{v,j} / y_0 \quad (14)$$

式中 y_0 为半通道高度。由于本文是用差分格式求解的, 用下式

$$\bar{\alpha}_{v,j} = \sum_{M_L} \alpha_{v,j} / M_L \quad (15)$$

代替(13)更为方便。式中 M_L 为 y 方向上的格点数, 等于 $\eta / \Delta\eta$ 。

三、计算结果与分析

选用 14 种平行流进口条件 (列于表 3) 进行了计算。其中条件 1 作为基本条件。把条件 1, 2, 3 列为一组, 研究速度变化对增益的影响。1、4~11 共九种条件列为第二组, 研究温度变化的影响。1、12~17 共七种条件列为第三组, 研究组份变化的影响。在图 1, K (或 x) 表示流动方向, L (或 y) 表示光轴方向。 $\Delta\eta$ 、 $\Delta\zeta$ 分别表示沿 η 、 ζ 的步长, $K = \zeta / \Delta\zeta$ 表示 ζ 方向格点数。应用 $\rho\mu = \text{常数}$ (层流边界层方程通常的假设), 很容易从方程 (1) 的参数定义中求出与 η 、 ζ 相对应的 x 、 y 值。

计算结果整理在图 2~10。图 2 是不同 K 值沿 η 方向的温度剖面图。由图 2 可见, 给定 K 值下的剖面曲线都有一个极大值, 随着 ζ 增加, 峰值温度逐渐偏向平行流 1。这种现象很可能是由于 H_2 的热速度比 F 大引起的。因为 H_2 会更快地扩散到 F 流中去, 产生化学反应, 使得峰值温度和激活分子浓度向 F 流偏移^[3]。

图 3 表示二股流在 $L=50$ 处受激 HF(V) 的质量分数与温度在流动方向上的变化。HF(2) 对 HF(1) 的反转很大, 可以推知会有较大增益。这主要是 HF(2) 的泵浦速率比 HF(1) 大三倍缘故。

图 4~6 分别表示, 在 $L=50$ 处振动能级从 $V=2 \rightarrow 1$, $V=1 \rightarrow 0$, $V=3 \rightarrow 2$, $J=0 \rightarrow 6$ 的 P 支跃迁的小信号增益沿流动方向的分布。在图 4 和图 5 中, 各 (V, J) 支增益值从大到小的顺序与文献 [1] 中的图 22、23 的顺序完全相同, 线型也相似, 说明本文与文献 [1] 得出的规律性结果是一致的。在图 4, $V=1 \rightarrow 0$ 曲线在 $K=100$ 时, 增益还在上升, 而在图 5 中 $V=2 \rightarrow 1$ 的各支曲线, 此时已有明显下降的趋势。这是由于 $V=1$ 的消激发速率系数比 $V=2$ 要小的缘故。至于图 6 中

表 3

参 数 条 件	u_1 m/sec	T_1 K	$Y_{F,1}$	$Y_{He,1}$	u_2 m/sec	T_2 K	$Y_{H,2}$	$Y_{He,2}$
1	1500	150	0.249	0.751	1500	150	0.251	0.749
2	2500	150	0.249	0.751	2500	150	0.251	0.749
3	3500	150	0.249	0.751	3500	150	0.251	0.749
4	1500	100	0.249	0.751	1500	100	0.251	0.749
5	1500	125	0.249	0.751	1500	125	0.251	0.749
6	1500	170	0.249	0.751	1500	170	0.251	0.749
7	1500	180	0.249	0.751	1500	180	0.251	0.749
8	1500	190	0.249	0.751	1500	190	0.251	0.749
9	1500	210	0.249	0.751	1500	210	0.251	0.749
10	1500	250	0.249	0.751	1500	250	0.251	0.749
11	1500	350	0.249	0.751	1500	350	0.251	0.749
12	1500	150	0.149	0.841	1500	150	0.351	0.649
13	1500	150	0.199	0.801	1500	150	0.301	0.699
14	1500	150	0.229	0.771	1500	150	0.271	0.729
15	1500	150	0.269	0.731	1500	150	0.231	0.769
16	1500	150	0.299	0.701	1500	150	0.201	0.799
17	1500	150	0.349	0.651	1500	150	0.151	0.849

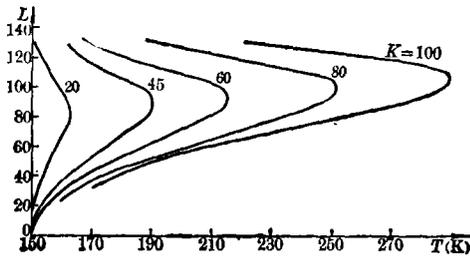


图 2 不同 K 值位置上的温度剖面图(条件 1)

$V=3 \rightarrow 2$ 的跃迁, $V, J=2, 1, 2, 2$ 的跃迁已经消失, 只留下 $J=3, 4, 5$ 的跃迁。从图 3 可见, HF(3) 对 HF(2) 的粒子数并没有反转, 增益纯属于转动能级的局部反转引起的。

图 9 表示初始速度 (条件为 1~3) 变化对增益的影响。在层流边界层条件下, 速度似不宜太大。图 10 是初始温度 T_0 (条件为 1, 4~11) 对平均增益的影响。每条曲线由 9

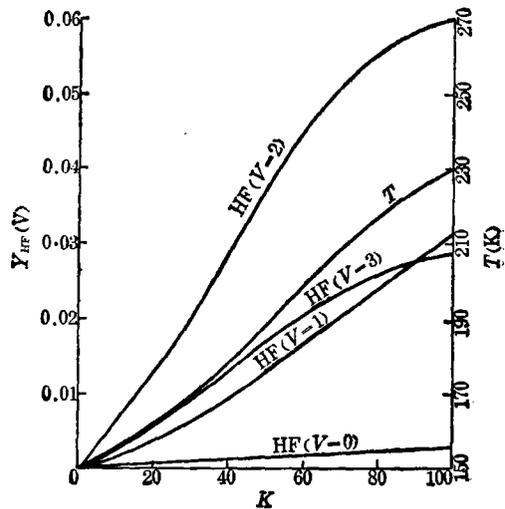


图 3 $Y_{HF(V)}, T$ 随流动方向的变化 (条件 1, $L=50$)

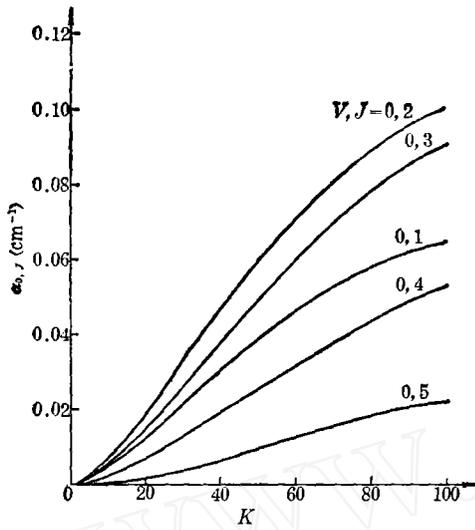


图4 小信号增益 $\alpha_{0,J}$ 随流动方向的变化
(条件1, $L=50$); $1 \sim 0$ 跃迁

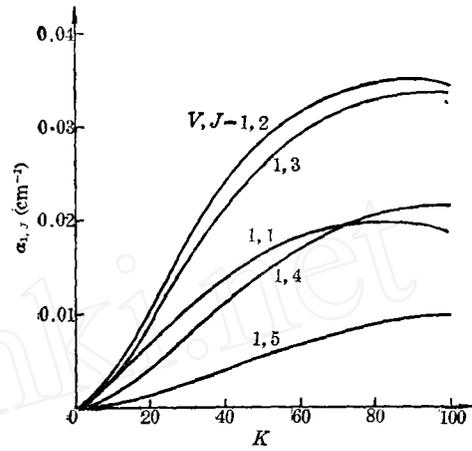


图5 小信号增益 $\alpha_{1,J}$ 随流动方向的变化
(条件1, $L=50$); $2 \sim 1$ 跃迁

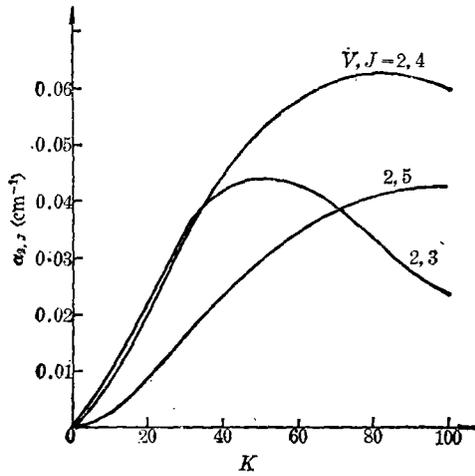


图6 小信号增益 $\alpha_{2,J}$ 随流动方向的变化
(条件1, $L=50$); $3 \sim 2$ 跃迁

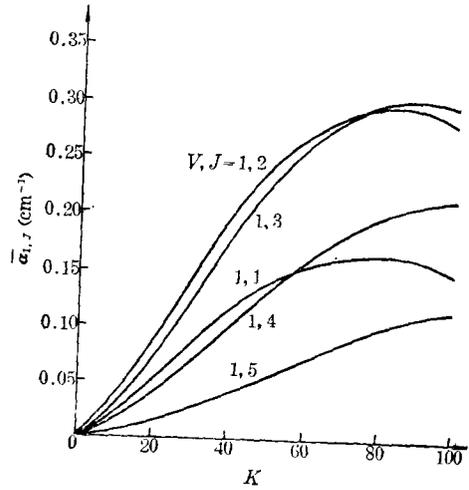


图7 平均增益 $\bar{\alpha}_{1,J}$ 随流动方向的变化
(条件1, $L=50$); $2 \sim 1$ 跃迁

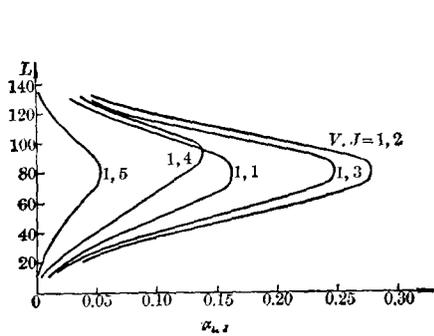


图8 小信号增益 $\alpha_{1,J}$ 的剖面图
 $K=30$

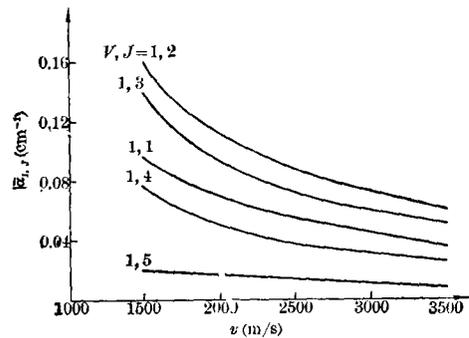


图9 初始速度对 $\bar{\alpha}_{1,J}$ 的影响
(条件1, 2, 3, $K=30$)

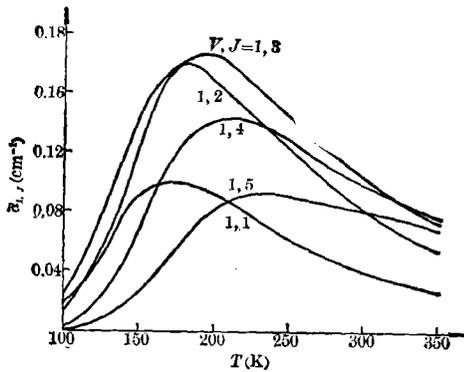


图 10 $\bar{\alpha}_{1,J}$ 随初始温度 T_0 的变化
(条件 1, 4~11, $K=30$)

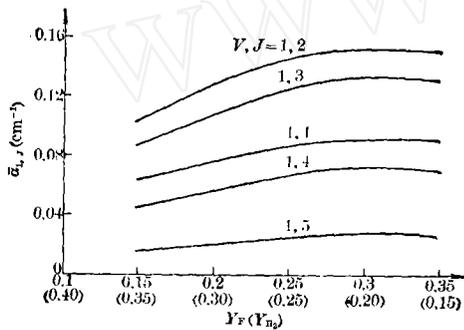


图 11 平均增益 $\bar{\alpha}_{1,J}$ 随初始质量分数的变化
(条件 1, 12~17, $K=30$)

点组成, 都有一个极值, 即有一个最佳初值温度。图 11 表示组份的质量分数对平均小信号增益的影响。每条曲线由 1、12~17 这七个条件下的计算值所组成。由图可见, 组份质量分数的变化对平均增益的影响比较小; 在其他条件固定时, F 、 H_2 、 He 也应有一个最佳比例。另外从图 10 还可以见到一个有趣现象, 初始温度变化时, 平均增益 $\bar{\alpha}_{1,J}$ (给定 V 值, 不同 J 值) 的各支曲线的极值位置是不同的。初始温度升高有利于较大 J 值的跃迁, 例如 $\bar{\alpha}_{1,1}$ 、 $\bar{\alpha}_{1,2}$ 的极值分别发生在 170 K 和 180 K 附近, 而 $\bar{\alpha}_{1,4}$ 、 $\bar{\alpha}_{1,5}$ 的极值大约发生在 210 K、230 K 处。而 H_2 质量分数的减少 (即 Y_F 相应增加) 对极值位置却无明显影响。此现象值得进一步研究。

由于本文与文献[1]采用的喷管参数, 初

始条件和某些物理化学参数如消激发速率系数, 粘性系数和采用的基元反应数目 (由于文献[1]考虑了热反应) 不尽相同, 要与[1]作全面比较是困难的。从上述的定性分析可以看到, 本文计算的各种曲线如温度、浓度、增益沿 ζ 或 η 的变化规律与文献[1]是一致的。定量比较则只能在初始条件差不多的情况下, 对计算值作一个简单的对照。

由文献[1]图 21 可得: $(V, J) = (1, 1)$ 在流动方向上的积分增益的极值为 0.09, 两个喷管的中心距离为 0.5 cm。这样由式 (14) 求得的平均增益为 0.18。而由本文图 7 求得的极值为 0.17, 二者偏差少于 10%。由文献[1]图 11 小信号增益曲线的极值与本文图 5 小信号增益曲线的极值比较, 可以得到文献[1]的 $\alpha_{2,2}$ 、 $\alpha_{2,3}$ 、 $\alpha_{3,1}$ 的极值分别为 0.38、0.37 和 0.21; 本文的对应值分别为 0.35、0.33 和 0.20, 相差小于 10%。当然这种对照是粗糙的, 不是定量的比较, 但至少能说明二者在量级上是一致的。

四、结 束 语

从上述分析可以认为, 本文与文献[1]所得的规律性结果是一致的, 细节上的差别并不影响对激光器性能的分析。图 9 和图 10 指出的最佳初始温度和浓度比的概念, 以及平均小信号增益 $\bar{\alpha}_{1,J}$ 的极值位置随初始温度变化的现象是可供实验工作者参考。本文介绍的方法比较简单, 计算时间很短, 适用于进行大量的数值实验分析。

参 考 文 献

- [1] A. P. Kothar, et al.; *AIAA Paper*, 1979, No. 79-0009.
- [2] S. N. Suchard et al.: *J. Chem. Phys.*, 1972, **57**, No. 12, 5065.
- [3] 周学华, 陈海韬; 《中国激光》, 1984, **11**, No. 9, 527.
- [4] J. Thoenes et al.: AD-784531.