

文章编号: 1001—4322(1999)02—0134—05

# 超音速氧碘化学激光器 二维小信号增益的数值模拟\*

多丽萍, 杨柏龄, 桑凤亭, 庄琦

(中科院大连化学物理研究所, 大连 116023)

摘 要: 建立了氧碘化学激光器简化的动力学模型, 利用N-S方程组, 数值模拟了超音速氧碘化学激光器小信号增益的二维分布, 所得结果随参数的变化趋势与实验结果比较一致。

关键词: 小信号增益; 计算机模拟

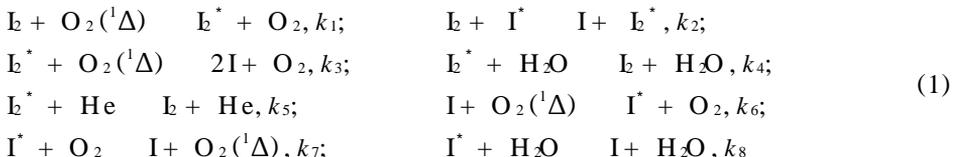
中图分类号: TN 248.5 文献标识码: A

氧碘化学激光器自1978年诞生<sup>[1]</sup>以来, 以其波长短, 效率高, 光纤传输性能好等诸多优点, 受到各国专家的关注和重视。随着氧碘化学激光器的发展, 输出功率的提高和激光器规模的加大, 高功率化学激光器的实验成本急剧上升; 此外, 新器件的研制周期也越来越长。为了降低成本, 缩短研制周期, 氧碘激光器数值模拟已成为当今热点。氧碘激光器经历了亚音速, 超音速, 工程演示之后, 重点已转移到提高化学效率上<sup>[2]</sup>, 这就要求对氧碘化学激光器运行条件及基本性能参数做更深入细致的研究。小信号增益作为氧碘激光器的一个基本参数, 各国已先后在实验和理论上做了研究和探索<sup>[3-5]</sup>, 我国已对氧碘激光器小信号增益做了测量<sup>[6,7]</sup>, 但在二维数值模拟方面还未见有论文发表。

本文利用氧碘化学激光简化的反应动力学模型和N-S方程组, 数值模拟了超音速氧碘激光器的二维小信号增益的分布, 并对结果作了讨论。

## 1 化学反应动力学模型及计算方法

氧碘化学激光器混合喷管及光腔内的粒子组分繁多, 反应复杂, 为了减少计算量, 又不失主要信息, 我们采用八种主要组分(O<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>(<sup>1</sup>Δ), I<sub>2</sub>, I<sub>2</sub><sup>\*</sup>, He, I, I<sup>\*</sup>, H<sub>2</sub>O)和八个化学动力学方程<sup>[8]</sup>来描述氧碘激光器二维增益数值模拟的动力学模型。



上述方程的反应速率常数 $k_i$ (单位为 $\text{cm}^3/\text{mol} \cdot \text{s}$ )为:  $k_1 = 7.0 \times 10^{-15}$ ,  $k_2 = 3.5 \times 10^{-11}$ ,  $k_3 = 3.0 \times 10^{-10}$ ,  $k_4 = 3.0 \times 10^{-10}$ ,  $k_5 = 4.0 \times 10^{-12}$ ,  $k_6 = 7.8 \times 10^{-11}$ ,  $k_7 = 1.0227 \times 10^{-10} \exp(-401.4/T)$ ,  $k_8 = 2.1 \times 10^{-12}$ 。

$$\text{氧碘化学激光器的小信号增益 } g = \sigma([I^*] - 0.5[I]) \tag{2}$$

其中,  $\sigma = 7.4 \times 10^{-18} (300/T)^{1/2} \text{cm}^2$ , 为受激发射截面;  $T$ 为腔内介质温度,  $[I^*]$ 、 $[I]$ 分别为激

\* 国家863激光技术领域及自然科学基金资助课题  
1998年4月28日收到原稿, 1999年2月2日收到修改稿。  
多丽萍, 女, 1968年3月出生, 理学博士, 副研究员

发态、基态碘原子浓度。通过数值模拟计算可得到温度、激发态碘原子浓度和基态碘原子浓度的二维分布,也就得到了小信号增益的二维分布。

为了计算碘化学激光器光腔中的二维温度场和两电子态的碘原子浓度场,我们采用 N-S 方程组来描述碘化学激光器超音速喷管和光腔中的流动和化学动力学过程。

$$\text{连续方程} \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \tag{3}$$

$$\text{动量方程} \quad \frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) + \nabla \cdot \mathbf{p} - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = 0 \tag{4}$$

$$\text{能量方程} \quad \frac{\partial (\rho H - p)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} H) + \nabla \cdot \mathbf{q} - \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{v}) = 0 \tag{5}$$

$$\text{组分方程} \quad \frac{\partial c_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} c_k) + \nabla \cdot \mathbf{J}_k - \sum_{s=1}^{N_r} w_{ks} = 0, \quad k = 1, 2, \dots, N_t \tag{6}$$

$$\text{理想气体状态方程} \quad \rho = pm / RT, \quad m = \left[ \sum_{k=1}^{N_t} \frac{c_k}{m_k} \right]^{-1} \tag{7}$$

其中,  $\rho$  为密度,  $p$  为静压力张量,  $\mathbf{v}$  为气流速度,  $H$  为总比焓,  $\mathbf{q}$  为热通量矢量,  $\boldsymbol{\tau}$  为粘性应力张量,  $c_k$  为  $k$  组分的质量百分数,  $\mathbf{J}_k$  为  $k$  组分的质量扩散通量矢量,  $w_{ks}$  为第  $s$  个化学反应形成  $k$  组分的生成速率,  $N_t$  为混合物的总组分数,  $N_r$  为化学反应方程个数,  $m$  为混合物的平均分子量。

具体解法可参见文献[9]。

## 2 简化模拟和初值条件

碘化学激光器超音速混合喷管结构形如喉道,在距喉道前 12mm 处,在亚音速区垂直地将碘注入主气流。为简化计算,不考虑混合过程,并假设在距喉道前 8mm 处,主副气流即氧与碘已经均匀混合。此后由各组分间的动力学过程产生浓度场、速度场和温度场等。计算区域见图 1。

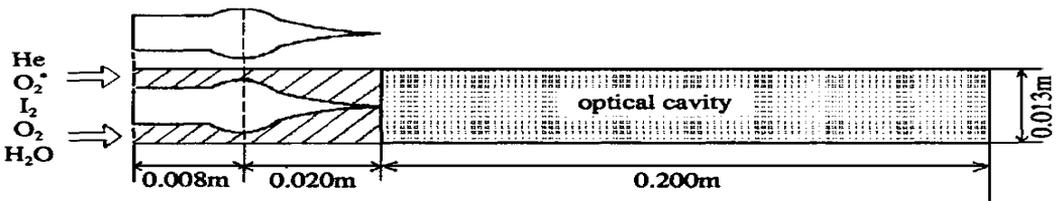


Fig 1 The computational field of nozzle and cavity

图 1 碘化学激光器喷管和光腔计算区域图

表 1 超音速 CO<sub>2</sub> SSG 二维数值模拟计算入口条件

Table 1 The nozzle entrance parameter of the supersonic CO<sub>2</sub>

	standard	case 1	case 2	case 3	case 4	case 5
$R_{I_2/O_2^*}/\%$	1.5	1.5	1.2	1.8	1.5	1.5
$R_{O_2^*/O_2^*}$	0.50	0.50	0.50	0.50	0.40	0.60
$R_{He/O_2^*}$	4.0	6.0	4.0	4.0	4.0	4.0

亚音速入口条件:  $P_0 = 5300\text{Pa}$ ,  $T_0 = 273\text{K}$ ;  $F_{I_2} = 10.2\text{mol/s}$ ,  $F_{H_2O} = 0.1\text{mol/s}$ 。计算的入口条件见表 1 所示,将摩尔流量比  $R_{I_2/O_2^*} = 1.5\%$ ,  $R_{O_2^*/O_2^*} = 0.5$ ,  $R_{He/O_2^*} = 4.0$  作为标准条件。我们

还模拟了不同单重态氧的产率、碘氧不同配比、氦氧不同配比条件下小信号增益的变化趋势。以上  $O_2^1\Delta$  为单重态氧分子;  $O_2^1\Delta$  代表总氧, 即单重态氧  $O_2^1\Delta$  与基态氧  $O_2$  的总和。

### 3 结果与讨论

在标准条件下 ( $R_{O_2^1\Delta}/O_2 = 1.5\%$ ,  $R_{O_2^1\Delta}/O_2 = 0.5$ ,  $R_{He}/O_2 = 4.0$ ), 计算得到的小信号增益分布 (SSG) 的结果见图 2(a), 表 2 为模拟计算出的 SSG 等值线分布数据。在模拟计算中将喷管出口位置定义为气流方向零点。x 为气流方向距喷管出口平面的距离, y 为列阵喷管一个周期的距离。从图 2(a) 中可以看到, 标准条件下, 最大增益为  $1.2\% \text{ cm}^{-1}$ , 位于喷管出口 3~4cm 之间。从整个区域来看, 氧碘激光器的增益区较长, 沿气流方向变化平缓。这些同实验测得的增益结果<sup>[7]</sup>是相吻合的。增益区较长, 这对于如何选择光轴位置和光腔尺寸显得很重要。光腔的提取面积若选在靠近喷管出口平面增益最大的位置, 这对功率提取有利, 但由于边界层的作用, 增益变化梯度很大, 即气流密度变化很大, 这将影响输出激光的光束质量<sup>[10]</sup>。由于沿流动方向的一定范围内增益变化缓慢, 腔轴适当后移, 这样既改善了光束质量, 对功率提取也无较大影响。因此在选择腔轴位置时, 既要考虑激光功率的提取效率, 也要注意输出激光的光束质量。

图 2(b~f) 分别给出了氧碘激光器不同  $O_2^1\Delta$  产率、碘氧配比、稀释比的情况下, SSG 分布的变化趋势。由图 2(b~c) 可以看出, 入口处  $O_2^1\Delta$  产率越高, 最大增益值越大, 并且前移。 $R_{O_2^1\Delta}/O_2 = 40\%$  时, 最大增益  $g = 0.8\% \text{ cm}^{-1}$ , 在 3~11cm 间;  $R_{O_2^1\Delta}/O_2 = 60\%$  时, 最大增益  $g = 1.4\% \text{ cm}^{-1}$  已前移到喷管出口之前了。图 2(d~e) 为不同碘氧配比的情况下, 超音速氧碘激光器小信号增益的二维分布。碘氧配比减小时, 最佳增益区后移, 虽然最大增益值有所降低, 但最大增益区域沿流动方向有所增加, 在最佳增益区内气流也更加均匀。当碘氧配比增加时, 最大增益的绝对值有所增大, 但它已经前移到喷管出口之前。另一方面, 整个区域的增益梯度增大, 使输出激光束的光强分布不均匀, 也即降低了光束质量。从图 2(a, f) 比较可看出, 稀释气体越多, 最大增益越后移,  $R_{He}/O_2 = 4.0$  时, 最高增益  $1.2\% \text{ cm}^{-1}$  位于 4cm 处,  $R_{He}/O_2 = 6.0$  时, 最大增益区已经后移到 20cm 以外了。

表 2 SSG 等值线分布的模拟计算结果

Table 2 The computational simulation datas of SSG g

$g/\text{cm}^{-1}$	1	2	3	4	5	6	7	
Fig 2(a)	0.00415906	0.00469912	0.00523919	0.00577925	0.00631931	0.00685938	0.00739944	
Fig 2(b)	0.002949	0.003348	0.003747	0.004146	0.004545	0.004944	0.005343	
Fig 2(c)	0.00510969	0.00581238	0.00651506	0.00721775	0.00792044	0.00862312	0.00932581	
Fig 2(d)	0.00289356	0.00325612	0.00361869	0.00398125	0.00434381	0.00470637	0.00506894	
Fig 2(e)	0.00525875	0.0060755	0.00689226	0.00770901	0.00852576	0.00934252	0.0101593	
Fig 2(f)	0.001623	0.001891	0.002159	0.002427	0.002695	0.002963	0.003231	
$g/\text{cm}^{-1}$	8	9	A	B	C	D	E	F
Fig 2(a)	0.0079395	0.00847956	0.00901963	0.00955969	0.0100998	0.0106398	0.0111799	0.0117199
Fig 2(b)	0.005742	0.006141	0.00654	0.006939	0.007338	0.007737	0.008136	0.008535
Fig 2(c)	0.0100285	0.0107312	0.0114339	0.0121366	0.0128392	0.0135419	0.0142446	0.0149473
Fig 2(d)	0.0054315	0.00579406	0.00615663	0.00651919	0.00688175	0.00724431	0.00760688	0.00796944
Fig 2(e)	0.01097	0.0117928	0.0126095	0.0134263	0.014243	0.0150598	0.0158765	0.0166933
Fig 2(f)	0.003499	0.003767	0.004035	0.004303	0.004571	0.004839	0.005107	0.005375

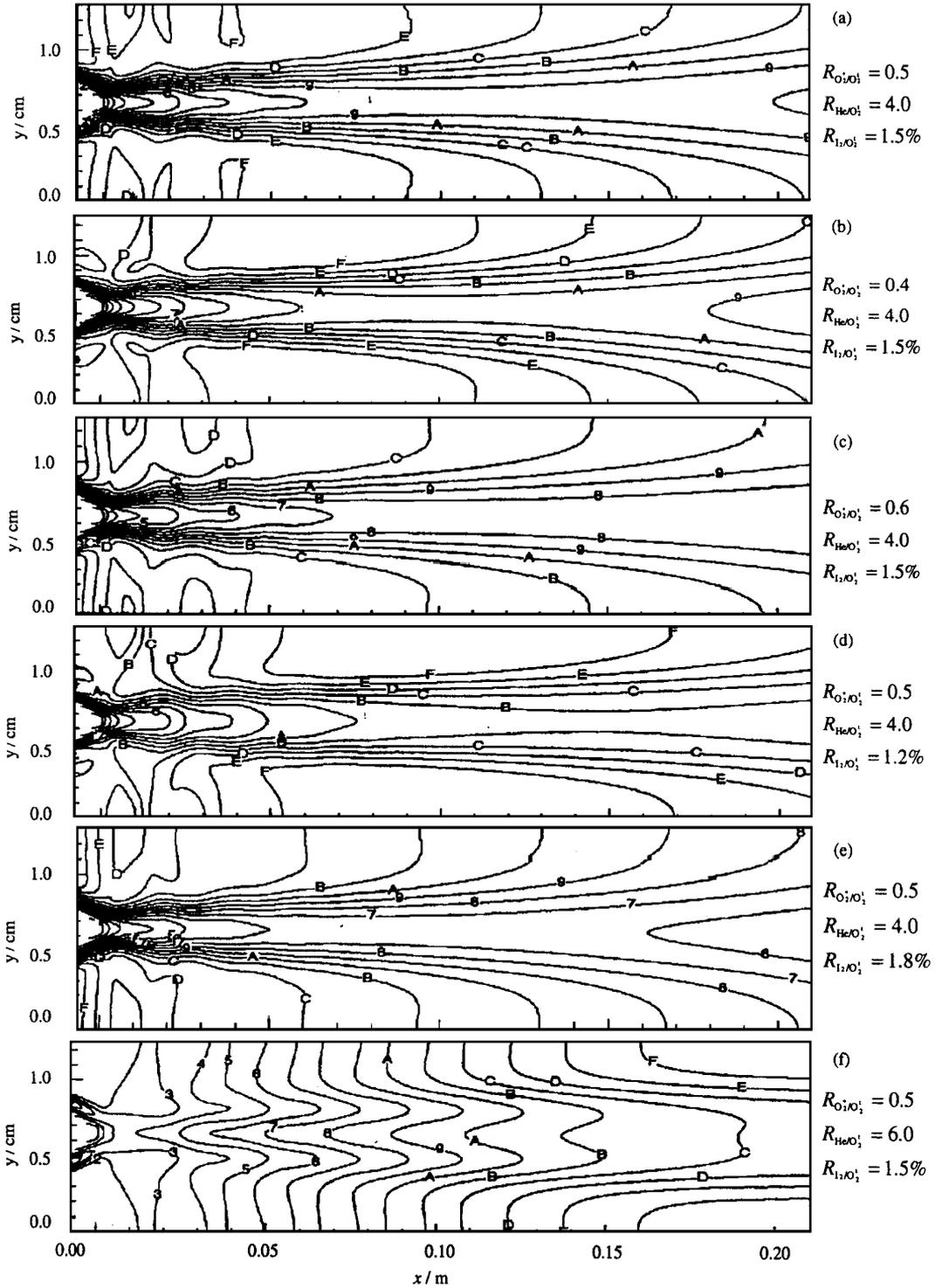


Fig 2 2D distribution of SSG in the cavity at different conditions

图 2 标准条件(a)和不同O<sub>2</sub>( $\Delta$ )产率(b, c)、不同氧碘配比(d, e)、不同稀释比(f)条件下氧碘化学激光器小信号增益的二维分布

## 4 结 论

由 N-S 方程组描述的, 由八个主要组分和八个主要化学动力学方程组成的, 不考虑混合过程的简化模型, 得到了超音速氧碘化学激光器小信号增益的二维数值模拟结果, 从理论上给出了不同参数下氧碘激光器的小信号增益分布的基本情况及变化趋势。这些计算结果与已有的实验结果相吻合。

## 参考文献

- 1 McDermott W E, Pchelkin N R, et al An electronic transition chemical laser *App Phys Lett*, 1978, **32**: 469
- 2 Truesdell K A, Helms C A, and Hager G D. A history of CO<sub>2</sub> laser development in the U.S.A. *SPIE*, 1994, **2502**: 217~ 237
- 3 Tate R F, Hunt B S, et al 2D gain measurements in a CO<sub>2</sub> laser device *AIAA*, 1994, **94**: 2438
- 4 Mito K, Ohue H, et al Measurements of gain profile in CO<sub>2</sub> laser using a tunable laser diode *SPIE*, 1993, **1810**: 505~ 508
- 5 Hishida M, Azami N, et al Flow and optical fields in a supersonic flow chemical oxygen iodine laser *AIAA*, 1997, **97**: 2391
- 6 多丽萍, 杨柏龄 连续波化学氧碘激光器的小信号增益和腔内损耗 *中国激光*, 1993, **20**(10): 33
- 7 多丽萍, 桑凤亭等 超音速化学氧碘激光器小信号增益二维分布的实验研究 *中国激光*, 1997, **24**(4): 289
- 8 Madden T J, Carroll D L, and Solomon W C. Detailed mixing in CO<sub>2</sub> laser devices *AIAA*, 1994, **94**: 2432
- 9 Jiang Z F, Hua W H, Zhao Y J. The effect on the CW hydrogen/deuterium fluoride chemical laser with different diluents *high-power lasers, SPIE*, 1996, **2889**: 141~ 146
- 10 多丽萍, 崔铁基, 曲英丽等 氧碘化学激光器 UR-90 腔光束质量研究 *强激光与粒子束*, 1998, **10**(1): 21~ 24

## THE COMPUTATIONAL SIMULATION OF TWO-DIMENSIONAL SMALL-SIGNAL GAIN OF A CO<sub>2</sub> LASER

DUO Liping, YANG Bailing, SANG Fengting, ZHUANG Qi

*Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Dalian, 116023 China*

**ABSTRACT:** A computational simulation for 2D small-signal gain of CO<sub>2</sub> laser was performed based on a simple kinetics model without considering mixing. Some results were obtained at different conditions. As comparing with the experimental results, both of the values and the trend of the small-signal gain are very close at standard condition.

**KEY WORDS:** small-signal gain; computational simulation