文章编号: 1001- 2486(2008) 06- 0043- 04

连续波 DF/HF 化学激光器喷管中氟原子复合计算*

李 兰, 华 卫红, 袁圣付, 姜宗福
(国防科技大学 光电科学与工程学院, 湖南 长沙 410073)

摘 要: 氟原子是连续波 DF/HF 化学激光器泵浦反应的重要参与者, 其浓度分布尤其直接影响冷反应型激光器的泵浦效率及激射强度。在参与反应之前, 氟原子将受到三体复合和壁面复合因素的影响而部分复合为氟分子。研究该因素对氟原子浓度的影响对激光器的分析优化是十分重要的。已有一定的实验方法可对其浓度进行测量研究, 并建立了理论模型描述。将其与计算流体力学方法相结合对氟原子分布进行计算, 研究了该方法的有效性, 并对不同收缩段型面下氟原子复合进行了计算研究。

关键词: DF/HF 化学激光器; 氟原子; 壁面复合; 计算流体力学
中图分类号: TN248. 5 文献标识码: A

Numerical Investigation of Fluorine-atom Recombination Model in CW DF/HF Chemical Laser Nozzle

LI Lan, HUA Wei-hong, YUAN Sheng-fu, JIANG Zong-fu
(College of Opto-electric Science and Engineering, National Univ. of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: As one of the most important components participating in the pumping reaction of CW DF/HF chemical laser, the distribution of fluorine-atom has direct influence on pumping and lasing especially for the cold-reaction operation. Because of free-stream recombination and wall-catalytic recombination, some of the fluorine atoms will be recombined with molecules before entering into the reaction region. It's very important to investigate fluorine-atom' distribution for the analysis and optimization of lasers. Some experimental methods have been developed and theoretical model has been established. The model and general computational fluid dynamics (CFD) tool were combined to compute the fluorine atom distribution. Its validity was tested, and cases under different converge contour were numerically studied.

Key words: DF/HF chemical laser; fluorine atom; wall-recombination; CFD

连续波 DF/HF 化学激光器经过近四十年的发展, 反应体系和相关技术已较为成熟。除了光腔段的激射环境、功率提取方式等因素外, 激光器的激射功率和效率将更受限于泵浦反应的效率。对冷反应体系, 泵浦反应的参与者主要为氟原子与氘气或氢气, 为提高效率, 当然希望氟原子发生器能产生高浓度的氟原子气流。但在气流冻结过程中(即经过超音速喷管加速), 由于喷管中的压力温度环境以及氟原子的三体复合和壁面复合过程, 部分氟原子将复合为氟分子。氟分子对冷反应型激光器是十分不利的, 它与氢或氘原子发生的热反应将释放高于冷反应 3~ 4 倍的热量, 从而抑制泵浦反应。因此, 氟原子浓度的变化直接影响着激光器的运转情况。对它进行研究是我们分析连续波 DF/HF 化学激光器结构性能的重要指标。已有一些实验手段实现了气流中氟原子浓度的测量, 在理论分析中也对氟原子复合过程建立了相关模型[1]。氟原子的三体复合过程已有较为统一的动力学分析, 而壁面复合也有模型建立[1], 但结合计算流体力学方法应用还未实现。基于在激光器数值模拟方面的工作, 我们将氟原子复合模型与计算流体力学方法相结合对激光器中氟原子浓度进行计算, 并分析了收缩段型面对氟原子复合的影响问题。

* 收稿日期: 2008- 07- 08
作者简介: 李兰(1983—), 男, 博士生。

1 氟原子壁面复合理论

在激光器的数值模拟分析中,常将喷管壁面简化处理为完全催化壁面。为了更细致地分析激光器内组分分布,以镍表面为例,结合表面反应的 Langmuir-Rideal 理论[1] 描述壁面复合过程:一个气相氟原子 F 与壁面碰撞并被吸附在表面活性中心 S 上,另一气相氟原子 F 碰撞被吸附的氟原子与之复合为氟分子 F_2 并脱离表面活性中心。过程可用下式表示:

$$\begin{array}{ccccc} F+ & \longrightarrow & F & F+\ F & \longrightarrow F_2+ \\ | & & | & | & | \\ S & & S & S & S \end{array} \tag{1}$$

文献[1]基于该理论建立了镍表面氟原子复合模型:该过程受物理、化学吸附、热脱附、复合脱附等因素的影响,求解稳态下各组分粒子壁面浓度的速率方程,可获得我们所关心的氟原子、氟分子分别在镍表面的覆盖比例 θ_F、θ_{F_2}(θ 表示单位面积上被活性中心吸附的组分占吸附中心总数的比例,下标代表组分),并引入了复合系数 γ 这一参量:

$$\gamma = \frac{2v_R}{N_F} = 2P\left(\theta_{F_p} + \theta_{F_c}\right) \tag{2}$$

式中,$v_R = PN_F\left(\theta_{F_p} + \theta_{F_c}\right)$,为复合速率;$P$ 为位阻因数,一般小于 1,为考虑气相氟原子与被吸附氟原子碰撞复合有效性的参量;N_F 为单位面积内碰撞壁面氟原子占该区域气相氟原子的比例,而 θ_{F_p} 与 θ_{F_c} 分别表示物理与化学吸附作用下氟原子表面覆盖比例。

可以说参量 γ 的引入是该模型的关键,表征了氟原子在壁面复合的程度,它的取值将决定壁面附近有多少比例的氟原子碰撞复合为氟分子。

在连续波 DF/HF 化学激光器典型运转温度条件下,化学吸附作用将占主要优势,因此复合系数可简化为

$$\gamma = \frac{2v_R}{N_F} = 2P\theta_{F_c} \tag{3}$$

将复合系数应用至边界条件,则壁面处氟原子浓度梯度分布就可根据反应平衡条件确定[3]:氟原子向壁面扩散的速率等于氟原子在壁面复合为氟分子的速率,即氟原子质量分数满足如下关系式:

$$D_F \frac{\partial W_F}{\partial y} = \gamma W_F v_F \tag{4}$$

式中,W_F:氟原子质量分数;y:壁面垂直方向单位矢量;D_F:氟原子分子扩散系数;v_F:氟原子运动速率。假设氟原子均以波尔兹曼速率分布律下的平均速度运动,$\bar{v}_F = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m_F}}$,$k$:波尔兹曼常数;$T$:温度;$m_F$:单个氟原子质量;因此,垂直于壁面方向氟原子、氟分子浓度梯度分别满足方程式(5)、(6)(氟分子浓度梯度关系式(6)可同理得到):

$$\left.\frac{\partial W_F}{\partial y}\right|_{y=0} = \frac{\gamma W_F}{D_F}\left(\frac{kT}{2\pi m_F}\right)^{1/2} \tag{5}$$

$$\left.\frac{\partial W_{F_2}}{\partial y}\right|_{y=0} = \frac{\gamma W_F}{2D_{F_2}}\left(\frac{kT}{2\pi m_F}\right)^{1/2} \tag{6}$$

对壁面处网格单元及其邻近单元应用此浓度梯度关系即可将壁面复合耦合至整个流场的组分分布计算中。

2 理论比较及计算分析

2.1 理论比较

该理论模型已在文献[1]中作了实验验证,且作者又利用该模型对 HF 化学激光器主喷管组分分布

进行了计算验证[3]。以往对 DF/HF 化学激光器的数值模拟工作也采用了前者模型计算氟原子壁面复合, 但基于简化及对壁面复合所做的理论分析[5], 都将壁面处理为完全催化模型[4], 即复合系数 γ 取为 1, 与壁面碰撞的氟原子均以氟分子形式脱离壁面。因此, 我们采用完全催化下的计算结果与之对比, 同时对无壁面复合条件下的流场进行了计算。

2.2　计算分析

将该理论模型应用至模拟程序中总包反应, 对激光器一典型的拉瓦尔喷管, 以镍表面为例进行了计算分析。对壁面复合反应的处理设置为镍表面活性中心密度 ρ_{site} 取程序中推荐值: $\rho_{site} = 10^{-7}$, 氟原子的覆盖比例 z_F 选为 10^{-4}(该参数取值范围多达几个量级, 暂取在范围中间)。对于速率常数 k, 假设壁面作为氟原子复合反应的第三体, 其系数为 1。复合离解反应的速率系数方程列于表 1。

表 1　化学反应速率方程

Tab. 1　Chemical reaction rate equations

三体反应	$F + F + M \rightarrow F_2 + M$	$1\times 10^{10}\times T^{-1}$
	$F_2 + M \rightarrow F + F + M$	$1.99\times 10^{15}\times T^{-1.325}\times \exp(-1.907\times 10^4/T)$
壁面反应	$F + F_{site} \rightarrow F_2$	$1\times 10^{10}\times T^{-1}$

注: M 为 F、F_2、He、HF、N_2, 参与壁面反应的两个氟原子分设为气相氟原子 F 和被壁面活性中心吸附的氟原子 F_{site}。

求解区域为一典型拉瓦尔喷管, 计算区域及网格划分(平面对称喷管只求解区域的一半即可) 如图 1 所示。喷管入口滞止参数如表 2 所示。

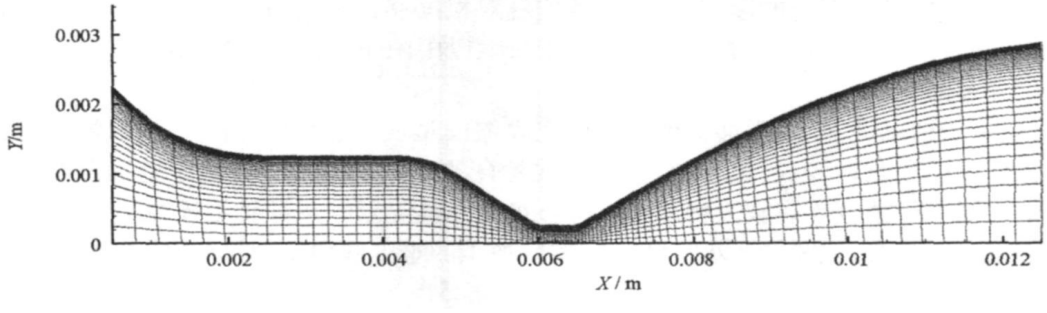


Fig. 1　Computation region and grid

图 1　计算区域及网格划分

表 2　喷管入口滞止参数列表

Tab. 2　Stagnation parameters at nozzle inlet

	total pressure/ atm	total temperature/ K	wall temperature/ K	species mass fraction				
oxidizer	0.9	2039	300	F	F_2	He	HF	N_2
nozzle				0.20841	0.0015	0.24305	0.40174	0.1453

两种处理方式下在喷管出口平面可得到几乎重合的氟原子分布曲线, 如图 2 所示。二维分布图形显示复合模型与完全催化模型的计算结果是基本一致的, 氟原子核心流被冻结, 大约占据喷管出口宽度的 83.3%, 壁面附近大量复合为氟分子。结合文献[3]分析原因: 氟原子复合主要发生于喷管亚音速段, 三体复合发生于喷管核心流位置, 但该处的高温高压环境使复合较少, 无壁面复合时的氟原子分布曲线更有利地证明了这一点; 而壁面复合主要发生于壁面附近, 反应区域十分有限, 它与核心流通过组分间的扩散建立组分平衡关系, 因此, 氟原子和氟分子的扩散控制了壁面反应过程, 理论模型中的平衡条件(5)、(6) 也表明了这一点。在相同的气动及组分条件下, 复合的多少或快慢不再起主要作用, 两者得到几乎相同的分布情况。

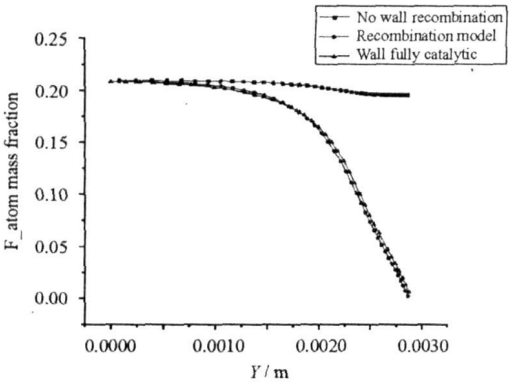


图 2 喷管出口截面氟原子质量分数曲线
Fig. 2 Fluorine-atom mass fraction profile at the nozzle outlet

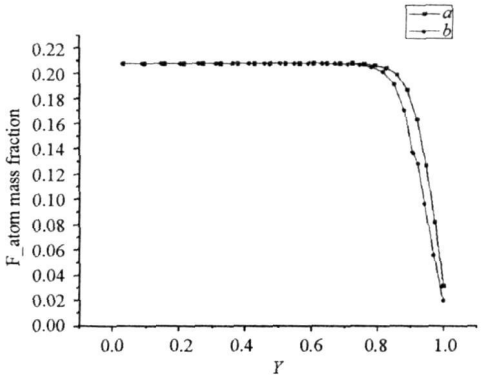


图 3 x = 2.967mm 处归一化氟原子分布
Fig. 3 Normalized fluorine-atom mass fraction at x = 2.967mm

3 收缩段型面影响

为防止边界层分离以及使喷管出口获得较为均匀的流场, 文献[2] 曾研究了喷管的收缩段和扩张段型面设计。喷管扩张段气流处于冻结状态, 氟原子复合主要发生在喷管收缩段, 文献[6] 对喷管收缩段型面对氟原子气相复合的影响做了研究, 结果显示移轴维氏曲线型比双三次方曲线型高出 5% 左右的氟原子流率, 但未考虑壁面复合的影响。因此, 我们针对根据移轴维氏曲线和双三次曲线设计的具有不同收缩段型面的两种喷管进行了计算。图 3 为位于收缩段中间位置的 x = 2.967mm 截面上氟原子质量百分比归一化分布曲线。

与文献[6] 中的结果类似, 采用移轴维氏曲线作收缩段型面, 喷管氟原子质量流较高。因为这样的型面使气流在喷管前段收缩较快, 速度较高, 从而被复合的氟原子较少。但由于壁面复合的存在, 两种型面下壁面附近氟原子浓度均有较大幅度的下降。虽然总体显示采用移轴维氏曲线设计收缩段可在一定程度上减少氟原子复合, 但相对于小尺寸喷管型面加工的难度和费用, 氟原子比例这种程度的提高显然是不值得的。

4 结 论

将描述氟原子壁面复合的理论模型应用至建立的激光器数值模拟程序中, 以实现对喷管中氟原子等组分细致的计算分析。由于基本由扩散过程控制壁面复合反应, 计算结果与采用壁面完全催化模型无大不同。从计算结果可以看出, 是否考虑氟原子壁面复合将严重影响对流场中氟原子浓度的计算分析。在无壁面复合条件下, 氟原子可保持高达 99% 的冻结效率; 而实际中一直存在的壁面复合将使喷管壁面附近大量氟原子复合为氟分子, 冻结效率下降至 65% 左右(在文中所考虑的具体算例中) , 这对光腔内混合泵浦反应, 尤其对仅依靠扩散实现反应气流混合的激光器影响极坏。在考虑壁面复合反应之后, 主要在壁面附近, 氟原子浓度有所下降。虽然结果显示采用移轴维氏曲线设计收缩段型面可在一定程度上减少氟原子复合, 但与小尺寸喷管复杂型面加工的难度和费用相比, 由于减小的幅度较小, 这种设计的必要性不大。因此, 在实际激光器设计中, 除了在冷却通道可以放置的前提下, 尽量缩短喷管入口的等面积段, 喷管型面一般作简单化处理是比较现实的。

参 考 文 献:

[1] Jumper E J, Ultee C J, Dorko E A. A Model for Fluorine Atom Recombination on a Nickel Surface[J]. Journal of Physical Chemistry, 1980, 84(1).
[2] 袁圣付. 连续波 DF/HF 化学激光器新型增益发生器的理论设计[D]. 长沙: 国防科技大学, 2002.
[3] Jumper E J, Wilkins R G, Preppernau B L. Wall-catalytic Fluorine Recombination in an HF Laser Nozzle[J]. AIAA Journal, 1988, 26: 57- 64.
[4] 华卫红. 高功率连续波 DF/HF 化学激光器数值模拟研究[D]. 长沙: 国防科技大学, 1997.
[5] Ferrell J E, Kendall R M, Tong H. Recombination Effects in Chemical Laser Nozzles[J]. AIAA 73- 643, 1973.
[6] 刘文广, 陆启生, 等. 收缩段线型对超音速喷管氟原子气相复合的影响[J]. 力学学报, 2006, 38(3): 392- 397.