

Моделирование двухдиапазонного непрерывного химического лазера на молекулах HF и HBr

Б.П.Александров, Б.И.Каторгин, А.А.Степанов

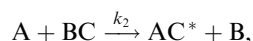
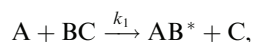
На основе полных уравнений Навье–Стокса выполнено численное исследование автономного непрерывного химического HF–HBr-лазера с одновременной генерацией на молекулах HF (длина волны $\lambda \sim 2.7$ мкм) и HBr ($\lambda \sim 4.2$ мкм). Показано, что достижима мощность излучения HBr-лазера с единицы площади соплового блока ~ 20 Вт/см² при длине лазерной зоны ~ 20 см. Соотношение мощностей излучения молекул HF и HBr регулируется разбавлением потока вторичного горючего бромом.

Ключевые слова: непрерывный химический лазер, двухдиапазонная генерация, газодинамическая модель Навье–Стокса.

1. Введение

Интерес к непрерывным химическим лазерам (НХЛ), способным работать одновременно на двух разных молекулах, обусловлен тем, что на их основе могут быть созданы достаточно мощные источники излучения с частотами, лежащими в различных спектральных диапазонах. Подобные лазеры в принципе могут найти применение как в целом ряде прикладных научных исследований, связанных, в частности, с прохождением излучения через атмосферу, с его воздействием на различные материалы, так и в химических и лазерных технологиях, лазерной локализации и связи, дистанционном газовом анализе окружающей среды и т. п. В литературе сообщалось о расчётно-теоретических исследованиях возможности получения одновременной непрерывной генерации в НХЛ на следующих сочетаниях молекул: HF–HCl [1], DF–CO₂ [2], HF–DF [3, 4].

Для реализации двухчастотного режима работы НХЛ весьма удобно воспользоваться тем обстоятельством, что существует определенный класс экзотермических химических реакций вида



в которых колебательно-возбуждённые молекулы образуются одновременно по двум каналам. При этом важно, чтобы константы скоростей k_1 и k_2 для обоих каналов были достаточно большими, а энерговыделения в каждом из них хватало бы для инверсного заселения колебательных уровней молекул-продуктов. К указанным реакциям относятся, например, реакции с участием атома водорода (либо его более тяжелого изотопа – дейтерия) и

молекул интергалогенов, в частности ClF, BrF, BrCl и некоторых других.

В работе [5] сообщалось о создании теоретической двумерной модели двухдиапазонного HF–HBr-лазера (на основе уравнений «узкого канала»), выполненного по схеме традиционного HF-лазера, в котором в поток вторичного горючего к молекулярному водороду добавлялись молекулы Br₂. В [5] выполнен расчёт для условий работы маломасштабного лабораторного лазера, описываемого в работе [6], и показано, что HF–HBr-лазер отличается от HF-лазера гораздо более интенсивным тепловыделением, что ухудшает усилительные свойства активной среды на частотах излучения молекул HF. При этом коэффициенты усиления на частотах излучения молекул HBr оказались на порядок меньше, чем на частотах излучения молекул HF.

В настоящей работе проведено расчётно-теоретическое исследование непрерывного HF–HBr-лазера с сопловой решёткой щелевого типа с шагом 7 мм. Расчёты выполнены с помощью модели, основанной на полных уравнениях Навье–Стокса. Эта модель позволяет детально исследовать режимы с поперечными градиентами давления и скачками уплотнения, характерными для потоков с сильным тепловыделением.

2. Математическая модель

Во многих НХЛ геометрия струйных течений в активной зоне является двумерной, как, например, в генераторах активной среды с плоской или цилиндрической щелевой конструкцией соплового блока (СБ). Ниже приведена двумерная математическая модель активной среды лазеров такого типа. Для общности рассматривается цилиндрическая конструкция (радиусом r_0) генератора активной среды автономного НХЛ (рис. 1), плоская конструкция является частным случаем цилиндрической конструкции большого радиуса. Сопловой блок в такой конструкции НХЛ представляет собой набор большого числа чередующихся соосных сверхзвуковых сопел окислителя и горючего. Прокачка струй осуществляется в радиальном направлении, их смешение и распространение

Б.П.Александров, Б.И.Каторгин, А.А.Степанов. ОАО "НПО «Энергомаш» им. акад. В.П.Глушко", Россия, Московская обл., 141400 Химки, ул. Бурденко, 1; e-mail: energo@online.ru

Поступила в редакцию 9 апреля 2008 г.

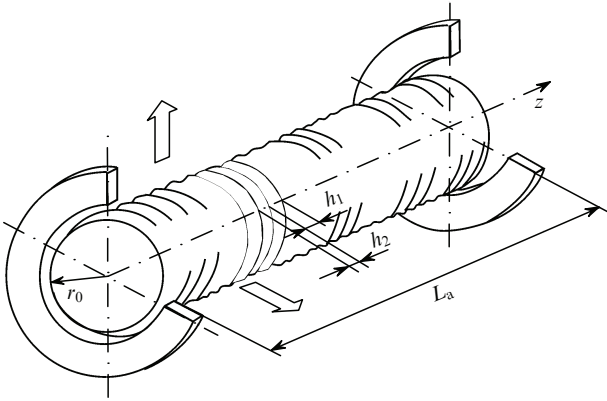


Рис.1. Эскиз моделируемого цилиндрического генератора активной среды НХЛ.

ние излучения – вдоль оси цилиндра z . Размеры потоков окислителя и горючего вдоль оси z на поверхности СБ обозначим через h_1 и h_2 соответственно, период сопловой решетки – через $h \equiv 2h^* = h_1 + h_2$.

При расчёте лазерной генерации рассматривался случай плоскопараллельного резонатора Фабри–Перо, образованного зеркалами кольцевой формы, в котором находится активная среда длиной L_a . В условиях не сильно различающихся коэффициентов отражения зеркал неоднородностью поля внутри резонатора вдоль оси z можно пренебречь. В этом случае при решении задачи достаточно рассматривать область $0 \leq z \leq h^*$ между плоскостями симметрии сопел горючего и окислителя.

Модель НХЛ основана на полной системе двумерных уравнений Навье–Стокса для течения многокомпонентной химически реагирующей колебательно-неравновесной газовой смеси при наличии резонансного излучения. Стационарное распределение параметров течения находится из решения нестационарной системы уравнений методом установления. Газовая смесь состоит из $N_c = \sum_k N_{v_k}$ компонентов, включая молекулы в различных колебательных состояниях (при равновесном распределении по вращательным квантовым состояниям), где N_{v_k} – число колебательных уровней молекулы k .

Систему нестационарных уравнений Навье–Стокса можно записать в следующей тензорной форме [7–10]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{V}) = 0, \quad \frac{\partial \rho V_\alpha}{\partial t} + \nabla(\rho V V_\alpha) - (\nabla \cdot \hat{\sigma})_\alpha = -(\nabla p)_\alpha,$$

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \nabla(\rho E \mathbf{V} + \mathbf{q}) = -p \nabla \mathbf{V} + (\hat{\sigma} \cdot \nabla) \mathbf{V} - \sum_k \sum_{v=1}^{N_{v_k}} g_v I_v,$$

$$\frac{\partial \rho c_k}{\partial t} + \nabla(\rho V c_k) + \nabla \mathbf{j}_k = \dot{w}_k + \frac{W_k}{N_A} \left(\frac{g_{v+1+l} I_{v+1+l}}{h v_{v+1+l}} - \frac{g_v I_v}{h v_v} \right),$$

$$k = 1, \dots, N_c,$$

где

$$\nabla = \mathbf{i} \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial z}$$

– символический вектор набла; $\alpha, \beta = x, y, z$;

$$p = \frac{\rho RT}{W}; \quad W = \left(\sum_{k=1}^{N_c} \frac{c_k}{W_k} \right)^{-1}; \quad E = \sum_{k=1}^{N_c} e_k c_k;$$

$$e_k = \int c_{vk}(T) dT + h_{k0} + e_k^{vib}; \quad \mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \sum_{k=1}^{N_c} h_k \mathbf{j}_k;$$

$$h_k = h_{k0} + \int c_{pk} dT + e_k^{vib}; \quad \mathbf{j}_k = -\frac{\rho}{B_k} \nabla c_k + \delta_k;$$

$$B_k = \sum_{i=1}^{N_c} \frac{W}{W_i} \frac{c_i}{D_{ki}};$$

$$\delta_k = \frac{W c_k}{B_k} \sum_{i=1}^{N_c} \left(\frac{1}{W_i D_{ki}} - \frac{1}{W_k D_{kk}} \right) \mathbf{j}_i + \frac{\rho W c_k}{B_k} \nabla \left(\frac{1}{W} \right).$$

При расчёте режима генерации использовалось условие квазистационарной генерации для колебательно-вращательных переходов Р-ветви (предполагалось, что характеристики зеркал резонатора Фабри–Перо не зависят от частоты излучения):

$$\int_0^{L_a} g_v dz = -0.5 \ln(r_1 r_2).$$

В приведённых уравнениях ρ, p, \mathbf{V} , и T – плотность, давление, скорость и температура смеси газов соответственно; E – внутренняя энергия единицы массы смеси; c_k – массовая доля компонента k в смеси; $\sigma_{\alpha\beta}$ – компоненты вязкого тензора напряжений $\hat{\sigma}$ (в пренебрежении второй вязкостью); $W_k, h_k, h_{k0}, c_{pk}, c_{vk}$ – соответственно молекулярный вес, удельные энтальпии, энтальпия образования в основном квантовом состоянии, теплоёмкость при постоянном давлении и теплоёмкость при постоянном объёме k -го компонента; e_k^{vib} – удельная энергия колебательного состояния; λ – коэффициент теплопроводности; D_{ki} – коэффициенты бинарной диффузии; \dot{w}_k – скорость изменения массы k -го компонента в процессах химической и колебательной кинетики; v_v, g_v, I_v – частота колебательно-вращательного перехода в полосе $v \rightarrow v - 1 - l$, локальный коэффициент усиления и интенсивность излучения на этом же переходе соответственно; l – номер обортона; r_1, r_2 – коэффициенты отражения зеркал резонатора; L_a – длина активной среды вдоль оптической оси.

Задача решалась в цилиндрических координатах r, z в области $0 \leq z \leq h^*, r_0 \leq r \leq r^*, t \geq 0$. На плоскостях симметрии задачи $z = 0, z = h^*$ граничные условия имеют вид

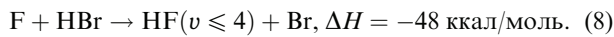
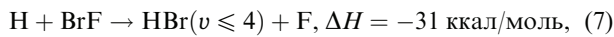
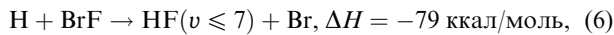
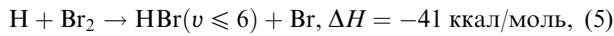
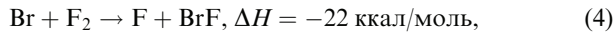
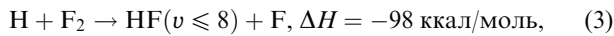
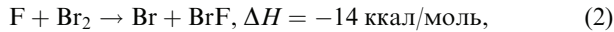
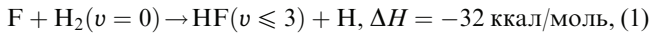
$$V_z = 0, \quad \frac{\partial \rho}{\partial z} = \frac{\partial V_r}{\partial z} = \frac{\partial E}{\partial z} = \frac{\partial c_k}{\partial z} = 0.$$

На границе $r = r_0$ задавались профили всех переменных задачи $f(r_0, z) = f_0(z)$, найденные в результате расчётов течений потоков окислителя и горючего в соплах по двумерной газодинамической модели «узкого канала» [11]. На границе $r = r^*$ для сверхзвукового течения использовались «мягкие» граничные условия: $\partial^2 f / \partial r^2 = 0$.

Стационарное решение системы уравнений получено разностным методом с использованием расщепления дифференциальных операторов по физическим процессам и пространственным направлениям [12]. Во всех расчётах задавалась точность сходимости решения $\varepsilon = 10^{-3}$, что, как показала практика, достаточно для нахождения точного решения.

В качестве кинетической модели НФ-лазера выбрана модель 1982 г. [13], кинетическая модель НВг-лазера детально описана в работе [5]. Здесь лишь приведём хими-

ческие реакции, которые обуславливают наработку колебательно-возбуждённых молекул HF(*v*) и HBr(*v*):



3. Результаты расчёта и их обсуждение

Выполнено исследование HF–HBr-НХЛ с плоской сопловой решёткой щелевого типа с шагом $h = 7$ мм. Выбраны следующие параметры сопел: длина «окислительного» сопла вдоль потока 12 мм, соотношение выходных сечений сопел окислителя и горючего 3 : 1, степень расширения «окислительных» сопел 17.

В традиционном HF-НХЛ в камеру сгорания подаются окислитель F_2 и первичное горючее D_2 , при этом окислитель всегда подается в избытке, так что отношение их концентраций $\alpha \equiv [F_2]/[D_2] > 1$. Значение $\alpha = 1$ соответствует стехиометрическому соотношению концентраций окислителя и горючего. Избыточный фтор практически полностью диссоциирует при высокой температуре, достигаемой в результате горения фтора с дейтерием. Температура продуктов сгорания зависит от содер-

жания в камере сгорания инертного разбавителя He, которое определяется (в расчёте на оставшийся после полного выгорания первичного горючего свободный условно молекулярный фтор) параметром $\psi \equiv (\alpha - 1)^{-1}[He]/[D_2]$ (степень разбавления). Из камеры сгорания высокотемпературная смесь поступает в лазерную зону через сверхзвуковые сопла. Параллельно в СБ по своим каналам подаётся вторичное горючее H_2 . Его количество характеризуется коэффициентом избытка $R_L \equiv (\alpha - 1)^{-1}[H_2]/[D_2]$.

Ниже приведены результаты расчёта для топливной композиции с параметрами $\alpha = 1.4$, $\psi = 10$, $R_L = 35$, расхода потока окислителя $0.36 \text{ г}\cdot\text{см}^{-2}\cdot\text{с}^{-1}$ в расчёте на единицу площади СБ и статического давления $p \sim 5$ Тор в активной среде у среза СБ.

Для реализации НХЛ с одновременной генерацией на молекулах HF и HBr в поток вторичного горючего впрыскивается молекулярный бром, содержание которого в смеси с H_2 обозначим параметром $\psi_{Br_2} \equiv [Br_2]/([H_2] + [Br_2])$. Добавление брома приводит к сильному повышению температуры в силу цепного характера протекающих экзотермических реакций. Наибольшее дополнительное тепловыделение происходит в процессах (5)–(8) с большим энергетическим выходом. В результате в потоке существенно повышаются температура и давление, и, следовательно, имеет место его торможение. Это иллюстрирует рис.2, где показаны линии уровней статического давления и температуры в случае 5 %-ного разбавления вторичного горючего бромом, т. е. для мольного соотношения фтора и брома в зоне смешения 1 : 1.75.

На рис.3 представлены распределения вдоль потока статического давления p на оси окислительного сопла и средней по сечению температуры газа

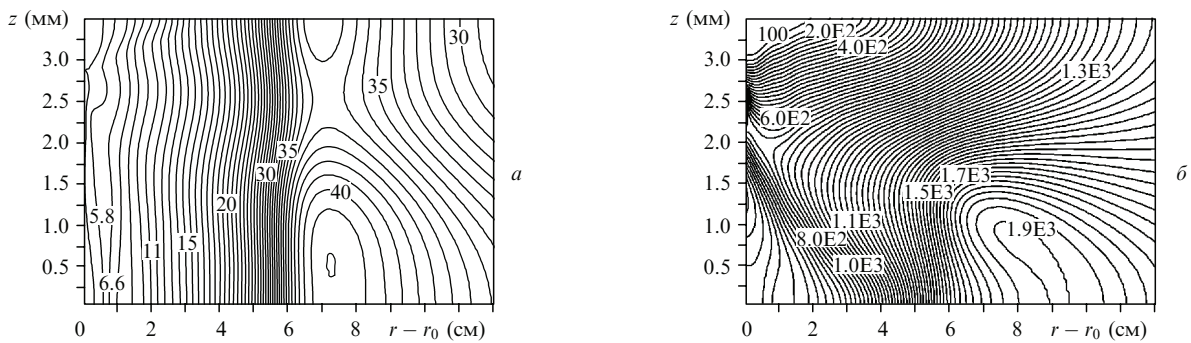


Рис.2. Линии уровней статического давления (в торрах) (а) и температуры (в кельвинах) (б); $\psi_{Br_2} = 0.05$.

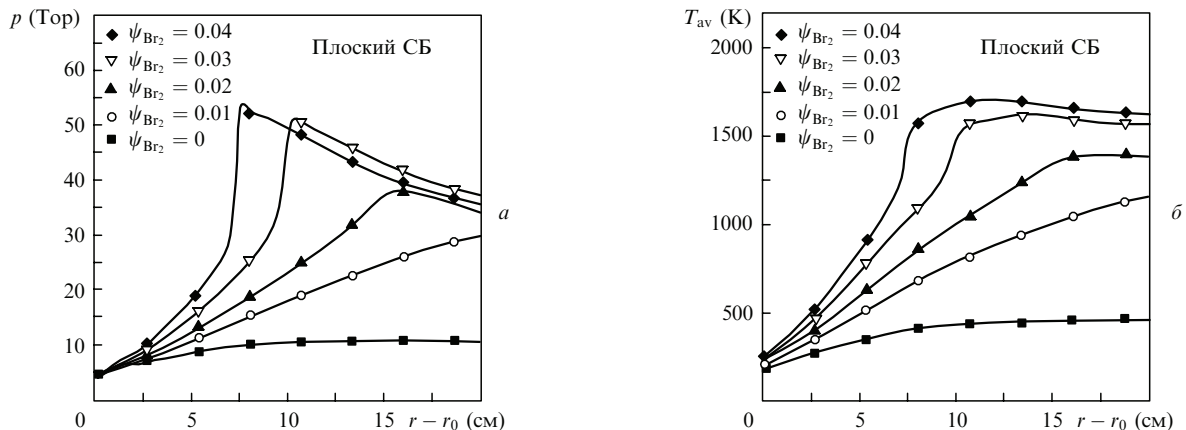


Рис.3. Распределения вдоль потока статического давления p (а) и средней по сечению температуры газа T_{av} (б) для разных степеней разбавления вторичного горючего бромом ψ_{Br_2} .

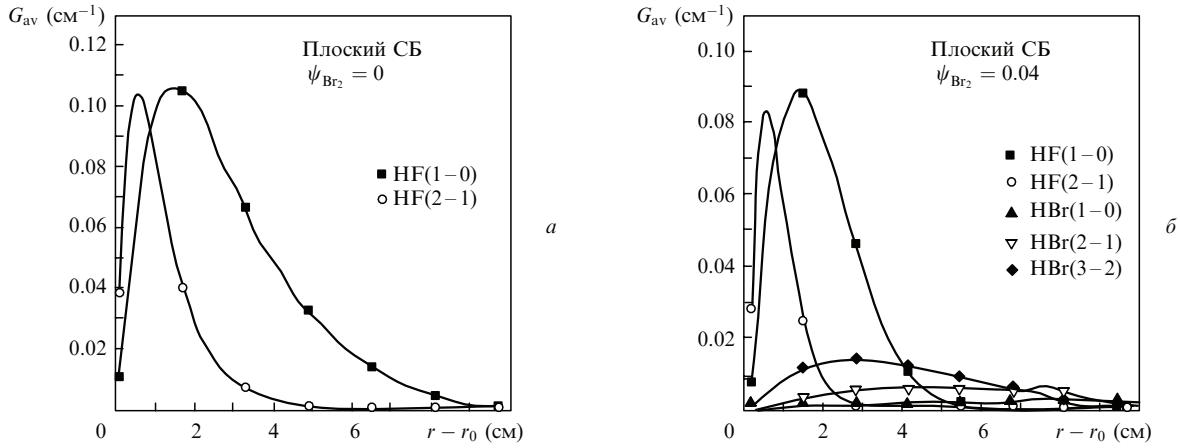


Рис.4. Распределения максимальных по J и усреднённых на периоде структуры сопловой решетки КУСС G_{av} на частотах колебаний молекул HF и HBr для неразбавленного вторичного горючего (а) и 4 %-ного разбавления его бромом (б).

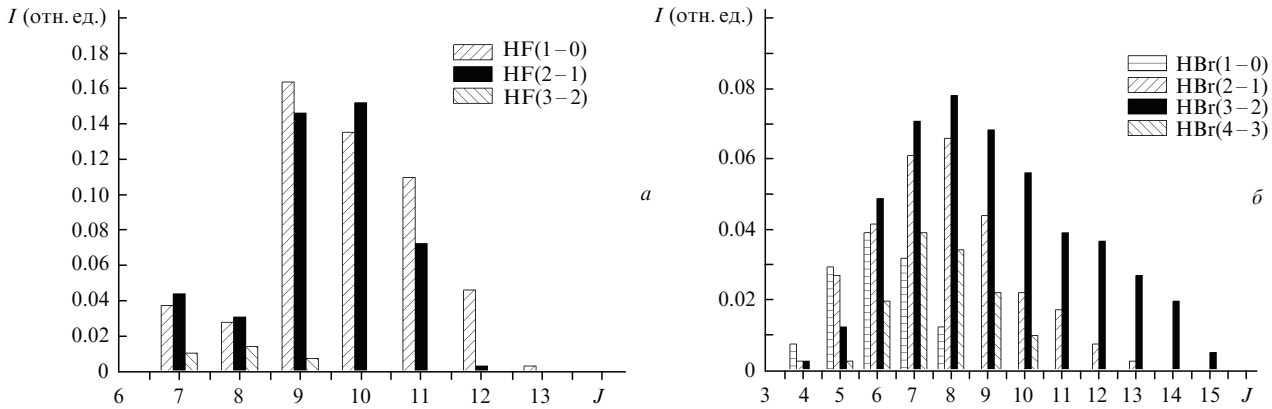


Рис.5. Спектры излучения в колебательных полосах молекул HF (а) и HBr (б) в случае 5 %-ного разбавления вторичного горючего бромом.

$$T_{av} = \int_0^{h^*} \rho V_r c_p T dz / \int_0^{h^*} \rho V_r c_p dz$$

для разных степеней разбавления вторичного горючего бромом ψ_{Br_2} . Отчётливо виден прямой скачок уплотнения при $\psi_{Br_2} \geq 0.03$, в котором достигается максимальная локальная температура ~ 2050 К (без брома температура в потоке не превышает 900 К).

Повышение температуры сильно сказывается на усилительных свойствах HF-лазера: зона усиления уменьшается, а коэффициент усиления слабого сигнала (КУСС) снижается. Это хорошо видно из рис.4, где показаны распределения максимальных по вращательному квантовому числу J и усреднённых на периоде сопловой структуры КУСС на частотах колебаний молекул HF и HBr для неразбавленного вторичного горючего (рис.4,а) и при 4 %-ном разбавлении его бромом (рис.4,б).

Усилительные свойства активной среды на частотах колебаний молекул HBr оптимальны при $\psi_{Br_2} \sim 0.02 - 0.04$, максимальный КУСС составил ~ 0.015 см⁻¹ в полосе P₃. При $\psi_{Br_2} > 0.04$ усилительные свойства HBr-лазера заметно ухудшаются вследствие сильного тепловыделения и «утяжеления» потока.

Помимо усилительных свойств исследовался также режим генерации для плоского СБ с длиной активной среды $L_a = 50$ см. Параметры зеркал резонатора Фабри–Перо предполагались одинаковыми для всех частот излучения и выбраны близкими к оптимальным для HBr-

лазера: коэффициенты отражения зеркал $r_1 = 0.99$, $r_2 = 0.925$, коэффициент пропускания выходного зеркала $t_2 = 0.07$ (пороговый коэффициент усиления $g_{th} = 9 \times 10^{-4}$ см⁻¹).

Спектры излучения в колебательных полосах молекул HF и HBr для 5 %-ного разбавления вторичного горючего бромом показаны на рис.5. Видно, что у молекулы HBr спектр гораздо богаче, чем у молекулы HF. Генерация наблюдается на линиях P₁(7–12), P₂(7–11) и P₃(7–8) молекул HF и на линиях P₁(3–8), P₂(4–11), P₃(4–12) и P₄(5–10) молекул HBr.

На рис.6 приведены распределения вдоль потока интенсивностей излучения в различных колебательных полосах молекул HF и HBr для $\psi_{Br_2} = 0.04$. На рис.7 показаны зависимости суммарной выходной мощности лазера P_{las} , приведённой к единице площади СБ, и длины зоны генерации Δl_{las} на частотах HF и HBr от степени разбавления вторичного горючего бромом. Приведённая мощность излучения молекул HBr достаточно слабо зависит от ψ_{Br_2} в диапазоне 0.01–0.04, а максимальное значение (~ 20 Вт/см²) достигается при $\psi_{Br_2} \approx 0.02$.

Зона генерации HBr-лазера существенно протяжённее, чем у HF-лазера, вследствие более слабой релаксации колебательных состояний молекул HBr(v). При оптимальной по мощности степени разбавления $\psi_{Br_2} \approx 0.02$ длина зоны генерации HBr-лазера составляет ~ 15 см. С увеличением ψ_{Br_2} длина зоны генерации на частотах молекул HF уменьшается в связи с повышением температуры и интенсификацией физико-химических процессов в

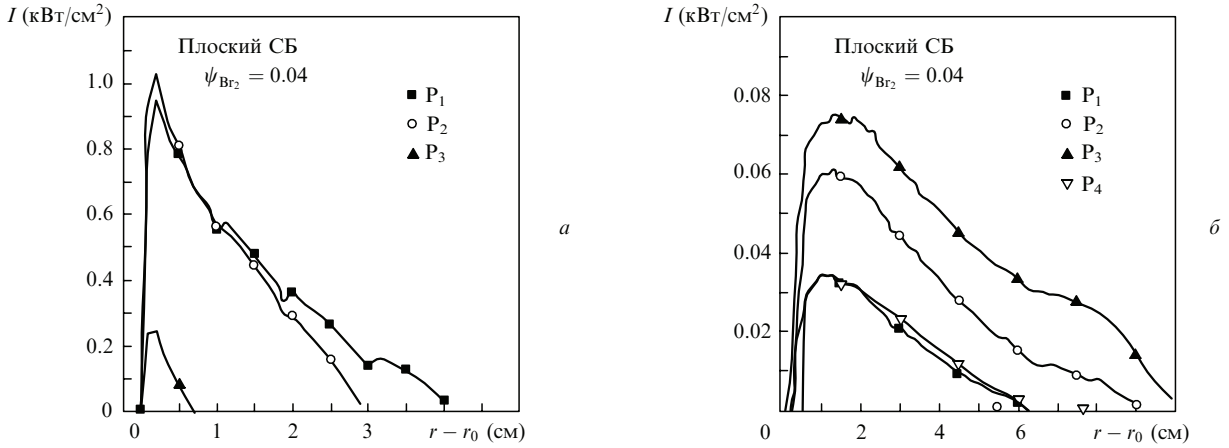


Рис.6. Распределения вдоль потока интенсивностей лазерного излучения I в различных колебательных полосах молекул HF (а) и HBr (б).

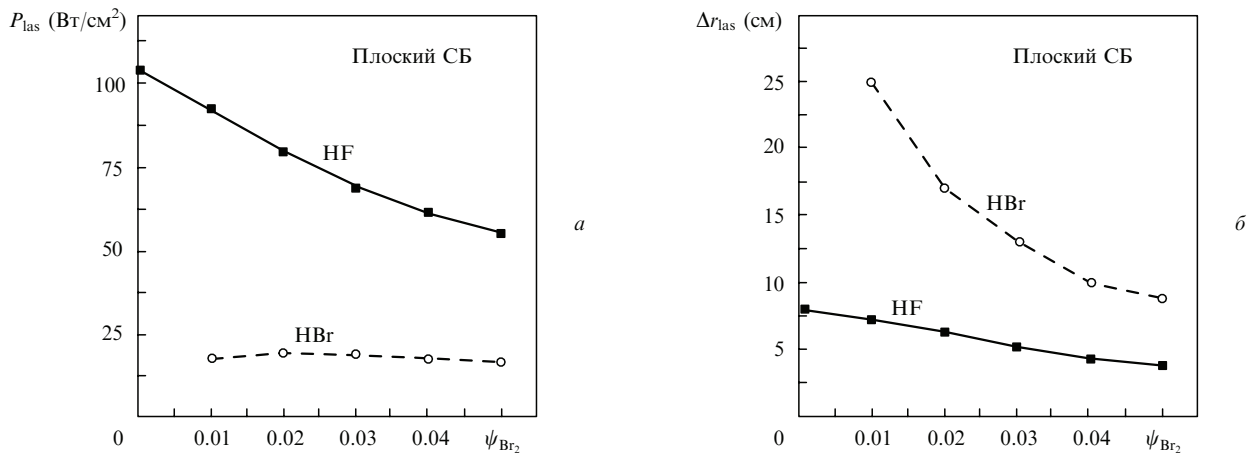


Рис.7. Зависимости от степени разбавления вторичного горючего бромом приведённой мощности излучения P_{las} (а) и длины лазерной зоны Δr_{las} (б) на частотах колебаний молекул HF и HBr.

активной среде, также достаточно резко снижается мощность, в частности при $\psi_{\text{Br}_2} = 0.05$ она вдвое меньше, чем при $\psi_{\text{Br}_2} = 0$.

Одним из способов снижения давления и температуры в активной среде является переход от плоской конструкции СБ к цилиндрической (или секторной). На рис.8 показано распределение вдоль потока статического давления и усреднённой температуры T_{av} в случае 5%-ного разбавления вторичного горючего бромом в отсутствие

излучения для нескольких цилиндрических генераторов с разными радиусами r_0 соплового блока. Переход от плоской конструкции СБ к цилиндрической с $r_0 = 5$ см позволяет снизить давление в зоне генерации в семь раз, а температуру – на ~ 1000 К. Это благоприятно сказывается на энергетических характеристиках лазера.

На рис.9 для 2%-ного и 5%-ного разбавлений приведены суммарная приведённая мощность генерации и длина лазерной зоны Δr_{las} для молекул HF и HBr в за-

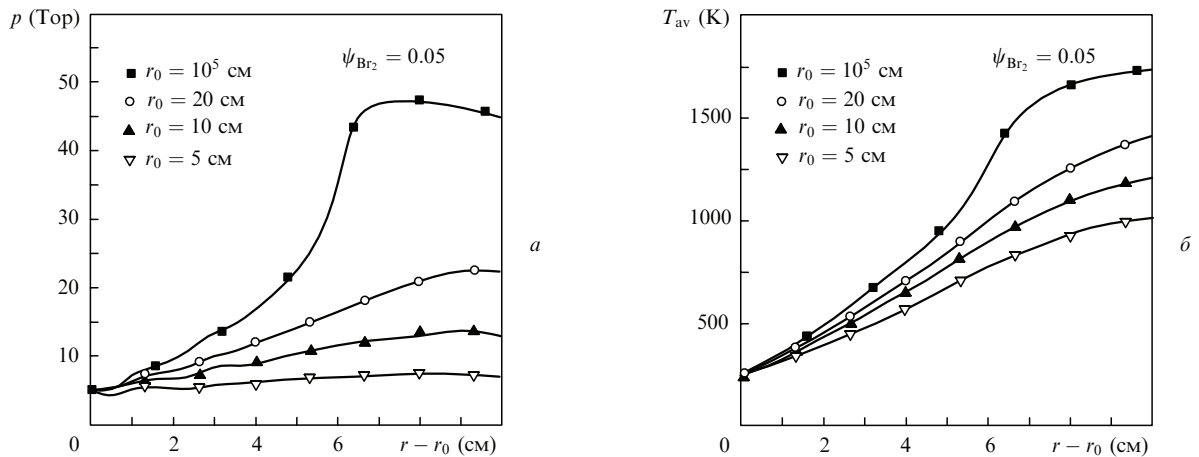


Рис.8. Распределения вдоль потока статического давления p (а) и средней по сечению температуры газа T_{av} (б) для 5%-ного разбавления вторичного горючего бромом при различных радиусах цилиндра r_0 .

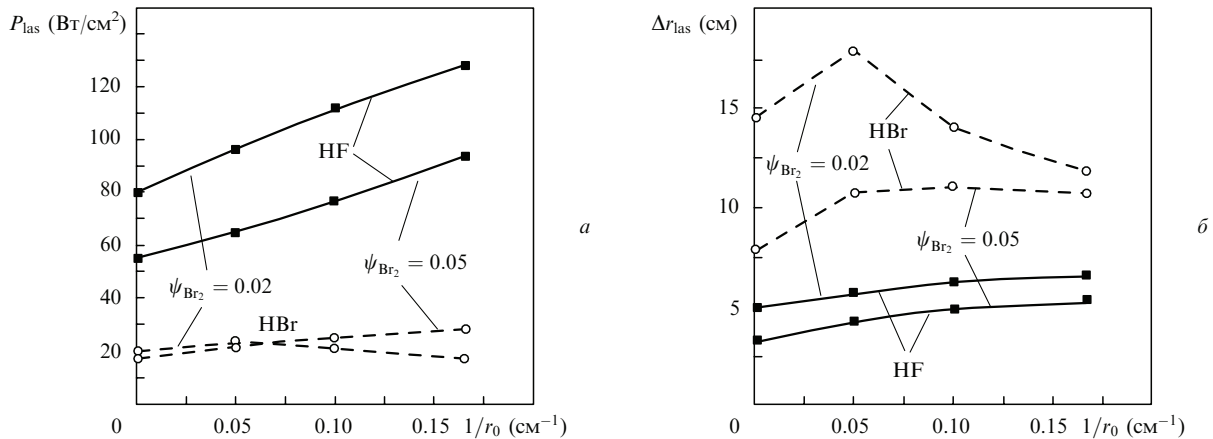


Рис.9. Зависимости приведённой мощности P_{las} (а) и длины лазерной зоны Δr_{las} (б) от кривизны соплового блока $1/r_0$ при различных ψ_{Br_2} .

висимости от кривизны соплового блока $1/r_0$ для описанного выше резонатора. При переходе от плоского СБ к цилиндрическому мощность излучения молекул HF увеличивается независимо от степени разбавления ψ_{Br_2} . Мощность излучения молекул HBr имеет максимум при некоторой кривизне блока, который смещается в сторону меньших r_0 при увеличении ψ_{Br_2} .

4. Выводы

1. Для рассмотренного варианта HF – HBr-НХЛ с одновременной генерацией в двух спектральных диапазонах на основе решения полных уравнений Навье – Стокса получены достаточно высокие приведённые мощности излучения на частотах молекул HBr ($P_{\text{las}} \sim 20$ Вт/см²) при длине лазерной зоны ~ 20 см.

2. Соотношение мощностей излучения в различных спектральных диапазонах ($\lambda \sim 2.7$ мкм (HF) и ~ 4.2 мкм (HBr)) регулируется подбором степени разбавления бромом вторичного горючего.

3. Переход от плоской конструкции СБ к цилиндрической (секторной) позволяет существенно снизить давление и температуру в лазерной зоне. Это приводит к заметному улучшению энергетических показателей подобного лазера.

4. Большое различие в длинах зон генерации на молекулах HF и HBr даёт возможность использовать два разнесённых в пространстве резонатора, что снимает проблему изготовления широкополосных полупрозрачных

зеркал резонатора с необходимыми параметрами в двух спектральных диапазонах.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 06-08-01335-а).

1. Степанов А.А., Шиканов В.А., Щеглов В.А. *Квантовая электроника*, **8** (4), 765 (1981).
2. Мартыщенко В.В., Степанов А.А. В сб.: *Труды НПО «Энергомаш»* (М., 2006, т. 24, с. 315–328).
3. Башкин А.С., Гуров Л.В., Каторгин Б.И. и др. В сб.: *Труды НПО «Энергомаш»* (М., 2007, т. 25, с. 395–411).
4. Александров Б.П., Безноздрев В.Н., Парфеньев М.В. и др. В сб.: *Труды НПО «Энергомаш»* (М., 2007, т. 25, с. 423–434).
5. Александров Б.П., Степанов А.А. В сб.: *Труды НПО «Энергомаш»* (М., 2001, т. 19, с. 318–334).
6. Miller D.J., Shackleford W.L., Emanuel G. *Appl. Phys. Lett.*, **35**, 506 (1979).
7. Гиршфельдер Д., Кертисс Ч., Берд Р. *Молекулярная теория газов и жидкостей* (М.: ИЛ, 1961).
8. Rotinian M.A., Strelets M.Kh., Shur M.L. *Proc. Int. Conf. on Laser Optics* (St. Petersburg, 1993).
9. Александров Б.П., Степанов А.А. В сб.: *Труды НПО «Энергомаш»* (М., 2007, т. 25, с. 435–448).
10. Aleksandrov B.P., Stepanov A.A. *Proc. SPIE Int. Soc. Opt. Eng.*, **6735**, 673509 (2007).
11. Александров Б.П., Степанов А.А., Щеглов В.А. *Квантовая электроника*, **24** (2), 163 (1997).
12. Ковеня М.В., Яненко Н.Н. *Метод расщепления в задачах газовой динамики* (Новосибирск: Наука, 1981).
13. Cohen N.J., Bott J.F. *TR-0083(3603)-2* (El Segundo, Cal., The Aerospace Corp., 1982).