

文章编号: 0258-7025(2009)02-0367-07

H + NCl₃ + HI 化学激光体系动力学模拟

李留成^{1,2} 多丽萍¹ 杨柏龄¹

(¹ 中国科学院大连化学物理研究所, 辽宁 大连 116023; ² 中国科学院研究生院, 北京 100049)

摘要 为了对 H + NCl₃ + HI 体系进行优化, 利用 Matlab 开发了化学动力学模拟计算程序, 使用一维预混模型对产生 NCl(a¹Δ)-I 传能化学激光的过程进行了化学动力学模拟计算。考察了不同温度下 H 原子, NCl₃ 和 HI 的初始粒子数密度及其化学计量比对小信号增益系数的影响。固定温度和 H 粒子数密度, 通过在一定的粒子数密度范围内进行扫描计算, 确定了最佳的 NCl₃/H 和 HI/H 配比范围。最后对 H, NCl₃ 和 HI 的化学计量比对最佳小信号增益系数及增益持续时间的影响进行了讨论。计算结果表明, 当温度为 400 K, 初始 H 粒子数密度分别为 $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 和 $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 时, 最佳小信号增益系数可分别达到 $2.6 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$, $2.6 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ 和 $2.6 \times 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$, 而相应 NCl₃/H 和 HI/H 的初始粒子数密度化学计量配比分别为 45% 和 11%。计算结果还发现, 随温度的逐渐升高, 获得最佳小信号增益系数的 NCl₃/H 和 HI/H 的初始粒子数密度化学计量配比逐渐增大, 而获得的最佳小信号增益系数也在增加。

关键词 激光物理; 化学动力学模拟; 小信号增益; H/NCl₃/HI; 生 NCl(a¹Δ)-I 传能化学激光

中图分类号 TN248.5 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/CJL20093602.0367

Chemical Kinetics Simulation for H + NCl₃ + HI Chemical Laser System

Li Liucheng^{1,2} Duo Liping¹ Yang Bailing¹

(¹ Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Dalian, Liaoning 116023, China)
(² Graduate University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract In order to optimize the H + NCl₃ + HI chemical laser system, a Matlab code for chemical kinetics simulations was developed and the process of 生 NCl(a¹Δ)-I energy transfer chemical laser of the system was simulated using a one-dimensional premixed model. The influences of H, NCl₃ and HI initial number densities and their ratios on small signal gain at different temperatures are examined. The optimum NCl₃/H and HI/H ratios are determined by scanning computations when the temperature and H number density are fixed. Finally, the influence of H, NCl₃ and HI ratios on maximum small signal gain coefficients and gain durations are discussed. It is shown that when temperature is assumed 400 K, initial H number densities are assumed $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, the maximum small signal gain coefficients can reach $2.6 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$, $2.6 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ and $2.6 \times 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$ respectively. The optimum NCl₃/H and HI/H ratios to achieve maximum small signal gain are 45% and 11%, respectively. It is also shown that the optimum NCl₃/H and HI/H ratios increase with the temperature, as well as the maximum small signal gain coefficients.

Key words laser physics; chemical kinetics simulation; small signal gain; H/NCl₃/HI; NCl(a¹Δ)-I energy transfer chemical laser

1 引 言

目前成熟的化学激光体系包括 HF 化学激光和氧碘化学激光^[1,2], 由于化学激光的主要能量来自

化学反应, 而且具有良好的放大性和光束质量, 因此化学激光在高功率激光应用方面具有独特的优势。自从 1990 年 Yang 等^[3]观察到生 NCl(a¹Δ)-I 的快

收稿日期: 2008-06-20; 收到修改稿日期: 2008-06-26

作者简介: 李留成(1979—), 男, 河南人, 博士研究生, 主要从事化学激光研究。E-mail: liliucheng@dicp.ac.cn

导师简介: 多丽萍(1968—), 女, 吉林人, 研究员, 硕士生导师, 目前研究方向为化学激光新体系探索及激光测试与诊断技术。E-mail: dlp@dicp.ac.cn

速传能后,基于生 $\text{NCl}(a^1\Delta)\text{-I}$ 传能的全气相化学激光器的研究已经取得了较大的进展。2000 年 Henshaw 等^[4]演示了功率为 180 mW 的连续波生 $\text{NCl}(a^1\Delta)\text{-I}$ 传能化学激光。多丽萍领导的组也在研究传能化学激光^[5~8],最近已获得了生 $\text{NCl}(a^1\Delta)\text{-I}$ 体系的正增益。

为了解决由于 HN_3 的易爆性所带来的规模放大瓶颈问题,从 2003 年开始,一些研究小组开始研究利用相对比较稳定的 NCl_3 来取代 HN_3 作为 $\text{NCl}(a^1\Delta)$ 的来源,并获得了较快的进展。2006 年, Bauer 等^[9]演示了 $\text{H}/\text{NCl}_3/\text{HI}$ 系统的光学透明,接近于获得光学增益。

由于有生 $\text{NCl}(a^1\Delta)\text{-I}$ 化学激光体系的化学动力学过程也已经得到了较为深入的研究,化学动力学数据已经相对完善,这就有可能采用化学动力学模拟计算的方法来对生 $\text{NCl}(a^1\Delta)\text{-I}$ 传能化学激光体系进行全面的理论分析,从而为实验设计提供参考数据和定性指导,提高实验效率。本文从化学动力学方面对 $\text{H}/\text{NCl}_3/\text{HI}$ 化学激光体系产生生 $\text{NCl}(a^1\Delta)\text{-I}$ 传能化学激光的过程进行了化学动力学模拟计算。

2 数学计算模型

假设有 m 个物种同时参加 n 个基元化学反应,则第 j 个物种的粒子数密度随时间的变化关系可以表示为

$$\frac{dN_j}{dt} = \sum_{i=1}^n v_{ij} k_i \prod_{j=1}^m N_j^{a_{ij}} \quad (1)$$

式中, N_j 为第 j 个物种的粒子数密度, t 为反应时间, v_{ij} 为第 j 个物种在参与第 i 个基元反应时的化学计量系数,当它作为反应物出现时 v_{ij} 取负值,当

它作为产物出现时 v_{ij} 取正值,当它不出现时取零, k_i 为第 i 个反应的反应速率常数, u_{ij} 定义为当 $v_{ij} < 0$ 时(即第 j 个物种在第 i 个反应中为反应物) $u_{ij} = |v_{ij}| = -v_{ij}$,而当 $v_{ij} \geq 0$ 时 $u_{ij} = 0$ 。

通过对(1)式微分方程系统进行积分,可以得到各个物种的粒子数密度随时间 t 的变化关系。特别地,对于气体流动管反应系统,利用物种的粒子数密度随时间的分布关系以及管内流体的线速度,可以进一步获得各个物种粒子数密度的空间分布。对于要研究生 $\text{NCl}(a^1\Delta)\text{-I}$ 传能化学激光系统,最令人感兴趣的是小信号增益系数 g ,它可以表示为

$$g = \sigma [N_{I(^2P_{1/2})} - \frac{1}{2} N_{I(^2P_{3/2})}] \quad (2)$$

式中 σ 为 I 原子的爱因斯坦受激辐射截面, $N_{I(^2P_{1/2})}$ 为激发态 I 原子的粒子数密度, $N_{I(^2P_{3/2})}$ 为基态 I 原子的粒子数密度。

采用一维预混模型,根据表 1 所列的基元化学反应^[5,6,10,11],在温度为 300 K, 400 K, 500 K 时,分别对 H_2 初始粒子数密度为 $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 时的小信号增益系数进行详细计算(其中 H_2 的解离效率设为 10%, He 粒子数密度固定为 H_2 的 10 倍),得到了不同情况下的小信号增益系数。

计算时的一般步骤是(忽略放电管中的解离过程,直接考虑从放电管流出的等离子体),先设定体系的反应温度,然后计算出等离子体中 H 原子和 H_2 的初始粒子数密度,并把 He 原子的初始粒子数密度设为放电解离前 H_2 粒子数密度的 10 倍,最后将 NCl_3 和 HI 的粒子数密度从 $1 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$ 到 $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 进行区间分割扫描计算,找出最优化的 NCl_3/H 和 HI/H 化学计量配比范围。

表 1 预混模型所包含的基元化学反应及其速率常数

Table 1 Elementary chemical reactions and their reaction rate constants in the pre-mixed model

Chemical reactions	Reaction rate constants	Chemical reactions	Reaction rate constants
$\text{H} + \text{HI} \rightarrow \text{I} + \text{H}_2$	1×10^{-11}	$\text{NCl}(a^1\Delta) + \text{I} \rightarrow \text{NCl}(\text{X}) + \text{I}$	$1 \times 10^{-12} \times T^{0.5} \times \exp(-320/T)$
$\text{H} + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{Cl} + \text{HCl}$	2.52×10^{-11}	$\text{NCl}(a^1\Delta) + \text{HI} \rightarrow \text{NCl}(\text{X}) + \text{HI}$	6.9×10^{-11}
$\text{H} + \text{Cl}_2(\text{B}) \rightarrow \text{Cl} + \text{HCl}$	2.52×10^{-11}	$2 \text{NCl}(a^1\Delta) \rightarrow \text{NCl}(\text{b}) + \text{NCl}(\text{X})$	6×10^{-13}
$3 \text{Cl} \rightarrow \text{Cl} + \text{Cl}_2$	$1.13 \times 10^{-32} \times T^{-0.88} \times \exp(725/T)$	$2 \text{NCl}(a^1\Delta) \rightarrow \text{products}$	7.2×10^{-12}

(续 表)

Chemical reactions	Reaction rate constants	Chemical reactions	Reaction rate constants
$2 \text{ Cl} + \text{ Cl}_2 \rightarrow 2 \text{ Cl}_2$	$5.65 \times 10^{-33} \times T^{-0.88} \times \exp(725/T)$	2 生 $\text{NCl}(a^1 \Delta) \rightarrow \text{ N}_2 + 2 \text{ Cl}$	7.02×10^{-12}
$2 \text{ Cl} + \text{ He} \rightarrow \text{ Cl}_2 + \text{ He}$	$1.13 \times 10^{-33} \times T^{-0.88} \times \exp(725/T)$	$2 \text{ NCl}(X) \rightarrow \text{ N}_2 + \text{ Cl}_2$	8×10^{-12}
$\text{ Cl} + \text{ H}_2 \rightarrow \text{ HCl} + \text{ H}$	$2.52 \times 10^{-11} \times \exp(-2214/T)$	$\text{ NCl}(b) \rightarrow \text{ NCl}(X)$	1.59×10^3
$\text{ Cl} + \text{ HI} \rightarrow \text{ I} + \text{ HCl}$	5×10^{-11}	$\text{ NCl}(b) + \text{ Cl} \rightarrow \text{ NCl}(a^1 \Delta) + \text{ Cl}$	3.6×10^{-14}
$\text{ Cl}_2(\text{ B}) + \text{ NCl}_3 \rightarrow \text{ NCl}_2 + \text{ Cl} + \text{ Cl}_2$	3×10^{-13}	$\text{ NCl}(b) + \text{ Cl}_2 \rightarrow \text{ NCl}(a^1 \Delta) + \text{ Cl}_2$	1.8×10^{-12}
$\text{ Cl}_2(\text{ B}) \rightarrow 2 \text{ Cl}$	1×10^4	$\text{ NCl}(b) + \text{ HCl} \rightarrow \text{ NCl}(a^1 \Delta) + \text{ HCl}$	3.8×10^{-14}
$\text{ Cl}_2(\text{ B}) + \text{ Cl} \rightarrow \text{ Cl}_2 + \text{ Cl}$	1.6×10^{-10}	$\text{ NCl}(b) + \text{ ICl} \rightarrow \text{ NCl}(a^1 \Delta) + \text{ ICl}$	7.2×10^{-12}
$\text{ H} + \text{ NCl}_3 \rightarrow \text{ HCl} + \text{ NCl}_2$	4×10^{-12}	$2 \text{ NCl}(X) \rightarrow \text{ N}_2 + 2 \text{ Cl}$	8.1×10^{-12}
$\text{ Cl} + \text{ NCl}_3 \rightarrow \text{ Cl}_2 + \text{ NCl}_2$	1.6×10^{-13}	$\text{ I}^* + \text{ I}_2 \rightarrow \text{ I} + \text{ I}_2$	3.6×10^{-11}
$\text{ NCl}_2 + \text{ NCl}_3 \rightarrow \text{ N}_2 + \text{ Cl}_2 + 3 \text{ Cl}$	$3.4 \times 10^{-11} \times \exp(-3250/T)$	$\text{ I}^* + \text{ HCl} \rightarrow \text{ I} + \text{ HCl}$	1.4×10^{-14}
$2 \text{ NCl}_2 \rightarrow \text{ N}_2 + \text{ Cl}_2(\text{ B}) + 2 \text{ Cl}$	6×10^{-13}	$\text{ I}^* + \text{ ICl} \rightarrow \text{ I} + \text{ ICl}$	2.3×10^{-11}
$\text{ H} + \text{ NCl}_2 \rightarrow \text{ HCl} + \text{ NCl}(a^1 \Delta)$	1×10^{-10}	$\text{ I}^* + \text{ Cl}_2 \rightarrow \text{ I} + \text{ Cl}_2$	2×10^{-14}
$\text{ Cl} + \text{ NCl}_2 \rightarrow \text{ Cl}_2 + \text{ NCl}(X)$	$0.67 \times 10^{-11} \times \exp(-1900/T)$	$\text{ I}^* + \text{ Cl} \rightarrow \text{ I} + \text{ Cl}$	1.5×10^{-11}
生 $\text{NCl}(a^1 \Delta) + \text{ Cl}_2 \rightarrow \text{ NCl}(X) + \text{ Cl}_2$	2.9×10^{-11}	$3 \text{ I} \rightarrow \text{ I} + \text{ I}_2$	$5 \times 10^{-33} \times \exp(2120/T)$
$\text{ NCl}(a^1 \Delta) + \text{ HCl} \rightarrow \text{ NCl}(X) + \text{ HCl}$	1.5×10^{-14}	$2 \text{ I} + \text{ He} \rightarrow \text{ I}_2 + \text{ He}$	$5.5 \times 10^{-34} \times \exp(575/T)$
$\text{ NCl}(a^1 \Delta) + \text{ H}_2 \rightarrow \text{ NCl}(X) + \text{ H}_2$	1×10^{-13}	$2 \text{ I} + \text{ I}_2 \rightarrow 2 \text{ I}_2$	$3.5 \times 10^{-33} \times \exp(2120/T)$
$\text{ NCl}(a^1 \Delta) + \text{ I} \rightarrow \text{ NCl}(X) + \text{ I}^*$	$1.1 \times 10^{-10} \times \exp(-519/T)$	$2 \text{ I} + \text{ HI} \rightarrow \text{ I}_2 + \text{ HI}$	8×10^{-32}
$\text{ NCl}(a^1 \Delta) + \text{ Cl} \rightarrow \text{ NCl}(X) + \text{ Cl}$	1×10^{-12}	$\text{ I} + \text{ Cl} + \text{ He} \rightarrow \text{ ICl} + \text{ He}$	6.3×10^{-32}
$\text{ NCl}(a^1 \Delta) + \text{ NCl}_3 \rightarrow \text{ NCl}(X) + \text{ NCl}_3$	1.1×10^{-12}		

Note: The units of the first-order, second-order and third-order reactions are s^{-1} , $\text{ cm}^3 \cdot \text{ s}^{-1}$ 和 $\text{ cm}^6 \cdot \text{ s}^{-1}$, respectively. $\text{ NCl}(a^1 \Delta)$, $\text{ NCl}(b)$, $\text{ NCl}(X)$, I^* and $\text{ Cl}_2(\text{ B})$ represents $\text{ NCl}(a^1 \Delta)$, $\text{ NCl}(b' \Sigma^+)$, $\text{ NCl}(X^3 \Sigma^-)$, $\text{ I}(5^2 P_{1/2})$ and $\text{ Cl}_2(\text{ B}^3 \Pi_{0u}^+)$, respectively.

3 计算结果与讨论

3.1 NCl_3/H 配比和 HI/H 配比对小信号增益系数的影响

通过改变 NCl_3/H 配比和 HI/H 配比进行小信号增益系数计算,考察了 $\text{NCl}_3/\text{HI}/\text{H}$ 配比对小信号增益系数的影响。图 1 给出了当温度为 400 K, H 粒子数密度为 $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, HI 粒子数密度为 $1.1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 时, NCl_3/H 配比对小信号增益系数的影响。图 2 给出了当温度为 400 K, H 粒子数密度为 $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, NCl_3 粒子数密度为 $4.5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 时, HI/H 配比对小信号增益系数的影响(当温度和 H 原子初始粒子数密度发生改变时,基本上也是这种趋势)。

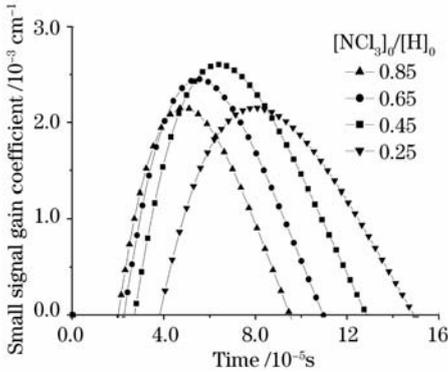


图 1 NCl_3 与 H 的初始粒子数密度对比对小信号增益的影响
Fig. 1 Influence of initial NCl_3/H ratio on small signal gain

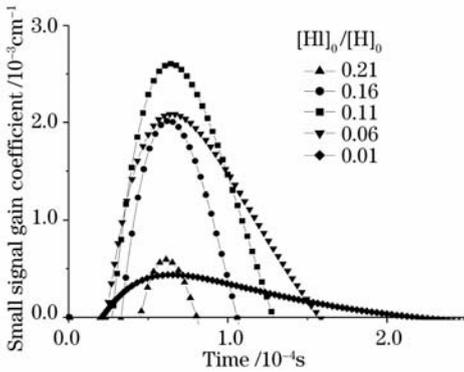


图 2 HI 与 H 的初始粒子数密度对比对小信号增益的影响
Fig. 2 Influence of initial HI/H ratio on small signal gain

从图 1 和图 2 可以看出,小信号增益系数最大值以及增益持续时间对 NCl_3 和 HI 的初始粒子数密度很敏感, NCl_3 和 HI 初始粒子数密度的可变化范围很小。当 NCl_3/H 配比和 HI/H 配比较小时,由于 NCl_3 和 HI 初始粒子数密度较小而导致反应物消耗较慢,从而延长了增益区的持续时间,但所能获得的最大增益却比较小;当它们比较大时,反应物的消耗很快,因此增益区的持续时间很小,不仅如

此,此时所能获得的最大小信号增益系数也变得比较小了。

另外从图 1 还可以看出,获得最大增益系数的时间受 NCl_3/H 配比的影响较大。随着 NCl_3/H 配比的增大,获得最大增益系数的时间逐渐变小,换句话说就是最大增益处逐渐向流动管的上游区靠近。相反,从图 2 可以看出, HI/H 配比的改变对获得最大增益系数的时间的的影响就很小,也就是说改变 HI/H 配比基本上不怎么改变最大小信号增益区在流动管中的位置。

最大小信号增益系数和增益区持续时间对各组分分配比的高度敏感性对实验中各组分的计量控制提出了更高的要求,必须使 NCl_3/H 及 HI/H 的化学计量配比处于一定范围内时,才能获得最优化的小信号增益系数。另外需注意的是,改变 NCl_3/H 配比对增益区在流动管中的位置有较大的影响。

3.2 NCl_3/H 和 HI/H 化学计量配比的最佳范围

固定温度为 400 K, H 粒子数密度为 $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 时,改变 NCl_3/H 配比和 HI/H 配比进行小信号增益系数的计算,观察二者对小信号增益的影响,其中 NCl_3 粒子数密度的扫描范围为 $1 \times 10^9 \sim 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, HI 粒子数密度的扫描范围为 $1 \times 10^9 \sim 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 。

扫描计算结果发现, NCl_3 和 HI 与 H 原子的初始粒子数密度的配比的确实存在最佳值范围。当改变温度和 H 粒子数密度时,通过扫描 NCl_3 和 HI 的粒子数密度进行计算也同样可以获得不同温度和不同 H 粒子数密度下 NCl_3/H 和 HI/H 的最佳配比范围。图 3 给出了在温度为 400 K, H 粒子数密度为 $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 时,对 NCl_3 和 HI 的粒子数密度在一定范围内进行扫描优化的典型情况。

从图 3 可以看出,在上述条件下,当 HI 与 H 的

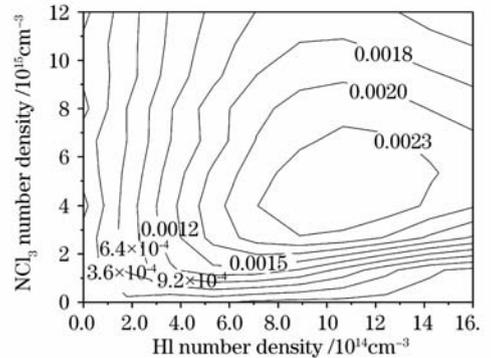


图 3 NCl_3/H 和 HI/H 初始粒子数密度配比的优化范围

Fig. 3 Optimum ranges of NCl_3/H and HI/H ratios

$$T=400 \text{ K}, [\text{H}]_0 = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$$

化学计量配比在 8%~16% 范围内变化, NCl₃ 与 H 的化学计量配比在 25%~75% 范围内变化时, H/NCl₃/HI 反应系统的小信号增益系数可稳定地维持在 0.23% cm⁻¹ 以上, 但当 HI 与 H 或 NCl₃ 与 H 的化学计量配比超出了这个最佳变化范围时, 则小信号增益系数下降得很快, 因此在实验中应当注意在最佳值范围附近进行各种气体的配比以取得较好的实验结果。

特别地, 若精确控制 NCl₃ 约为 H 的 0.45 倍, HI 约为 H 的 0.11 倍时, 可以获得全局最大的小信号增益系数, 该全局最大小信号增益系数可达 2.6 × 10⁻³ cm⁻¹。因此, 在实验中将 NCl₃/H 和 HI/H 的化学计量配比控制在 0.45 和 0.11 附近可以获得最好的实验结果。

3.3 温度和 H 初始粒子数密度对 NCl₃/H 和 HI/H 最佳配比范围的影响

按照扫描计算方法, 扫描计算了温度分别为

300 K, 400 K, 500 K, 初始 H 粒子数密度分别为 1 × 10¹⁵ cm⁻³, 1 × 10¹⁶ cm⁻³, 1 × 10¹⁷ cm⁻³ 时, NCl₃/H 和 HI/H 化学计量配比的最佳范围。图 4 给出了扫描计算的结果。

从图 4 可以看出, 温度对 NCl₃/H 和 HI/H 化学计量配比的最佳范围的影响较大, 随温度的升高, NCl₃/H 和 HI/H 最佳化学计量配比逐渐增大。与温度的影响不同的是, 初始 H 粒子数密度的改变对 NCl₃/H 和 HI/H 化学计量配比的最佳范围几乎没有影响。

温度从 300 K 升高到 500 K 时, NCl₃/H 的最佳配比从 40% 增大到 45%, 约增大了 0.1 倍, 而 HI/H 的最佳配比从 8% 增大到 13%, 约增大了 0.6 倍, 显然温度对 HI/H 最佳配比的影响更大一些。因此在实验中如果升高温度时, 一定要考虑增大 HI/H 的化学计量配比, 才能有效地获得最优化的的小信号增益系数。

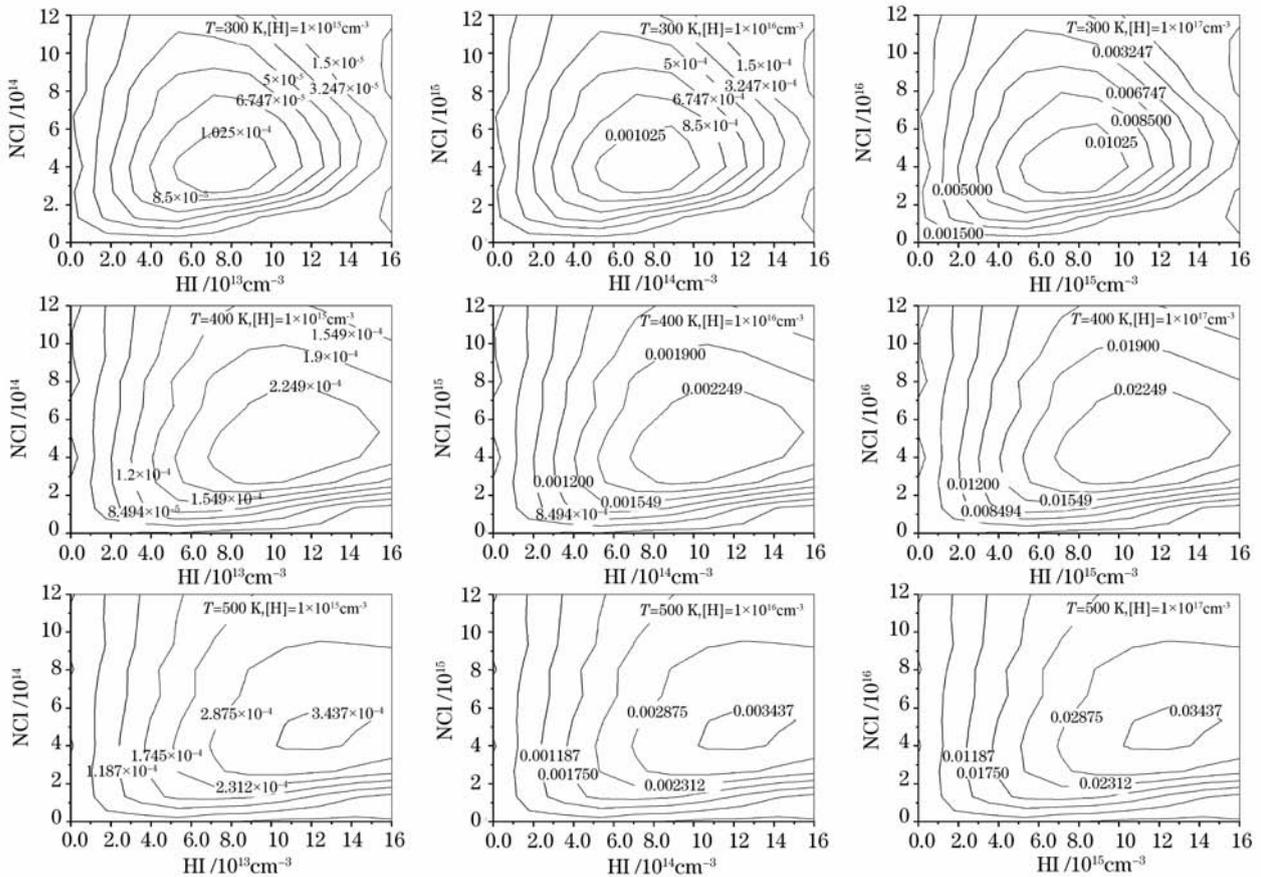


图 4 温度和初始 H 粒子数密度对 NCl₃/H 和 HI/H 最佳配比范围的影响

Fig. 4 Influence of temperature and initial H number density on optimum ranges of NCl₃/H and HI/H ratios

表 2 不同温度和不同 H 初始粒子数密度下的最优化化学计量配比及相应的最大小信号增益系数和增益持续时间
Table 2 Optimum NCl_3/H and HI/H and responding maximum small signal gain coefficients and gain duration at different temperatures and H number densities

Temperature/K	$[\text{H}]_0/\text{cm}^{-3}$	$[\text{NCl}_3]_0/\text{cm}^{-3}$	$[\text{HI}]_0/\text{cm}^{-3}$	Gain coefficient/ cm^{-1}	Gain duration/ μs
300	1×10^{15}	4×10^{14}	8×10^{13}	1.17×10^{-4}	730.9
300	1×10^{16}	4×10^{15}	8×10^{14}	1.18×10^{-3}	73.9
300	1×10^{17}	4×10^{16}	8×10^{15}	1.19×10^{-2}	7.5
400	1×10^{15}	4.5×10^{14}	1.1×10^{14}	2.60×10^{-4}	1009.3
400	1×10^{16}	4.5×10^{15}	1.1×10^{15}	2.60×10^{-3}	101
400	1×10^{17}	4.5×10^{16}	1.1×10^{16}	2.61×10^{-2}	10.2
500	1×10^{15}	4.5×10^{14}	1.2×10^{14}	3.56×10^{-4}	1981.9
500	1×10^{16}	4.5×10^{15}	1.2×10^{15}	3.56×10^{-3}	200.5
500	1×10^{17}	4.5×10^{16}	1.2×10^{16}	3.56×10^{-2}	19.7

3.4 温度和 H 初始粒子数密度对最优化小信号增益系数的影响

表 2 给出了在不同温度和不同 H 初始粒子数密度下,最优化的 NCl_3 和 HI 的粒子数密度及相应的最优化小信号增益系数和增益的持续时间。很显然,随着温度的逐渐升高,获得的最佳小信号增益系数在逐渐增加,而小信号增益的持续时间也在逐渐增加,与此同时,获得最佳小信号增益系数的 NCl_3/H 和 HI/H 的初始粒子数密度化学计量配比也在逐渐增加。

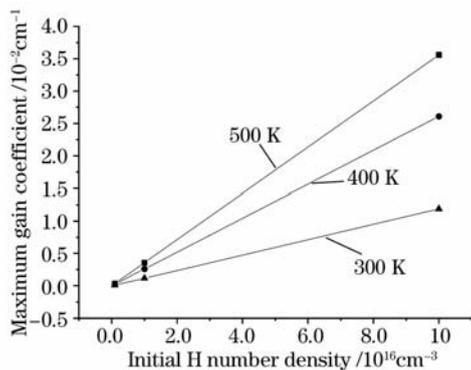


图 5 初始 H 粒子数密度对小信号增益系数最大值的影响
Fig. 5 Influence of initial H density and temperature on maximum small signal gain coefficient

计算结果还表明, $\text{H}/\text{NCl}_3/\text{HI}$ 体系的小信号增益系数与反应物种的初始粒子数密度关系很大。图 5 给出了体系的反应温度和 H 初始粒子数密度对最大小信号增益系数的影响情况。可以看出,在所研究的温度范围和 H 粒子数密度范围内,最大小信

号增益系数随初始 H 粒子数密度的增加基本上呈线性增加趋势,而最大小信号增益系数随反应温度的升高也在逐渐增加,但增加的幅度渐渐减小。

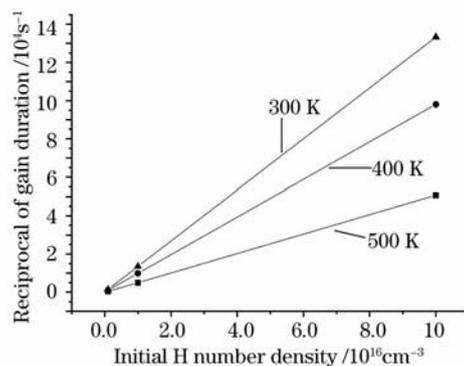


图 6 初始 H 粒子数密度对小信号增益系数持续时间的影响
Fig. 6 Influence of initial H density and temperature on gain duration

然而,在小信号增益系数最大值随初始 H 粒子数密度的增加而持续增加的同时,增益持续时间却随 H 粒子数密度的增加而大幅度缩短。图 6 给出了不同反应温度下 H 初始粒子数密度对增益持续时间的情况。很显然,在所研究的温度范围和初始 H 粒子数密度范围内,增益持续时间的倒数基本上与初始 H 粒子数密度呈线性关系,也就是说增益持续的时间与初始 H 粒子数密度呈现反比的经验关系,初始 H 粒子数密度越大则增益的持续时间越短,二者接近于倒数关系。从图 6 还可以看出,与 H 粒子数密度对小信号增益的影响有所不同的是,随温度的升高,不但小信号增益在持续增加,而且增

益持续时间也在逐渐变长。

4 结 论

为了对 H/NCl₃/HI 化学反应产生 NCl(a¹Δ)-I 传能激光的体系进行参数优化,利用开发的 Matlab 程序进行了化学动力学模拟计算。在不同的温度和 H 粒子数密度下,通过扫描计算获得了最优化的 NCl₃/H 和 HI/H 初始粒子数密度配比范围。不同温度下的最佳化学计量配比范围不同,随温度的升高,最佳化学计量配比范围略有增大。相反,H 初始粒子数密度对于最佳 NCl₃/H 和 HI/H 配比几乎没有影响。400 K 时的最佳化学计量配比为: NCl₃ 约为 H 的 45%,HI 约为 H 的 11%。400 K 时,初始 H 粒子数密度为 $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 时,最大小信号增益系数可分别达到 $2.60 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$, $2.60 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ 和 $2.61 \times 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$ 。

最大小信号增益系数随初始 H 粒子数密度的增加基本上呈线性增加趋势,但增益持续时间则与 H 粒子数密度呈经验反比关系,所以提高初始 H 粒子数密度是提高 H/NCl₃/HI 体系小信号增益系数至关重要的因素,同时也要考虑它对增益持续时间的影响。与 H 粒子数密度的影响不同的是,随着温度的升高,不但最大小信号增益系数在增大,而且增益持续时间也逐渐增加。

小信号增益系数最大值和增益持续时间对各个组分的化学计量配比高度敏感,要想获得较大的小信号增益系数和较长的增益持续时间,就必须精确地计量控制各反应物组分的初始粒子数密度。

参 考 文 献

- 1 Du Yanyi, Shu Xiaojian, Li Shouxian. Effects of heat release from near-resonant energy transfer on chemical oxygen-iodine laser[J]. *Acta Optica Sinica*, 2007, **27**(7):1224~1227
杜燕贻,束小建,李守先. 近共振传能放热对氧碘化学激光器性能的影响[J]. *光学学报*, 2007, **27**(7):1224~1227
- 2 Yan Baozhu, Yuan Shengfu, Lu Qisheng *et al.*. Effect of output power on the pressure of cavity in continuous wave DF chemical lasers[J]. *Chinese J. Lasers*, 2008, **35**(2):211~215
闫宝珠,袁圣付,陆启生等. 功率提取对连续波 DF 化学激光器腔压的影响[J]. *中国激光*, 2008, **35**(2):211~215
- 3 T. T. Yang, R. D. Bower. I(² P_{1/2}) produced from the energy transfer from NCl(a¹Δ) to I(² P_{3/2}) [C]. *SPIE*, 1990, **1225**: 430~438
- 4 T. L. Henshaw, G. C. Manke II, T. J. Madden *et al.*. A new energy transfer chemical laser at 1.315 μm [J]. *Chem. Phys. Lett.*, 2000, **325**:537~544
- 5 Duo Liping, Li Guofu, Li Jian *et al.*. Review and possibility of a chemical iodine laser pumped by NCl(a¹Δ) [J]. *Chinese J. Quantum Electronics*, 2001, **18**(5):385~390
多丽萍,李国富,李健等. NCl(a¹Δ) 泵浦碘原子化学激光综述及可行性分析[J]. *量子电子学报*, 2001, **18**(5):385~390
- 6 Tang Shukai, Duo Liping, Sang Fengting. Influence of NCl(a¹Δ) self-annihilation on energy extraction of NCl(a¹Δ)/I laser [J]. *Chinese J. Lasers*, 2005, **32**(4):501~505
唐书凯 多丽萍 桑凤亭. NCl(a¹Δ) 自猝灭对 NCl(a¹Δ)/I 激光能量提取的影响[J]. *中国激光*, 2005, **32**(4):501~505
- 7 Duo L. P., Tang S. K., Yu H. J. *et al.*. DC discharge characteristics and fluorine atom yield in NF₃/He [J]. *Chin. Opt. Lett.*, 2006, **4**(3):170~172
- 8 Wang Zengqiang, Duo Liping, Sang Fengting *et al.*. Experimental research of near resonant energy transfer from SiO(^{b³} Π) to Na [J]. *Chinese J. Lasers*, 2008, **35**(4):529~533
王增强,多丽萍,桑凤亭等. SiO(^{b³} Π) 与 Na 近共振传能实验研究 [J]. *中国激光*, 2008, **35**(4):529~533
- 9 A. J. R. Bauer, S. Lee, D. Vu *et al.*. Studies of an advanced iodine laser concept [C]. *SPIE*, 2006, **6101**:610121
- 10 T. J. Madden, T. L. Henshaw, G. C. Manke II *et al.*. A model for the NCl(a¹Δ)-I transfer chemical laser [C]. 31st AIAA Plasmadynamics and Lasers Conference. *AIAA*, 2000~2423
- 11 W. McDermott, R. Coombe, J. Gilbert *et al.*. Flow tube studies of NCl₃ reactions [C]. *SPIE*, 2004, **5334**:11~17