

H₂-O₂-Cl₂混气光化学点火特性^{*}

曹会东, 李 锋, 王孝利, 陈 维

(北京航空航天大学 能源与动力工程学院, 北京 100083)

摘 要: 为了研究在 H₂-O₂-Cl₂ 混气中以光化学方式点火的具体物理化学过程, 首先建立分析模型, 然后根据此模型计算不同爆炸波后压力和温度下的光化学点火过程中温度变化以及各种粒子的浓度变化, 最后根据计算结果进行绘图, 并深入分析光化学点火过程。分析结果表明, 光化学点火方式可以适应高空下的低压状况; 在温度达到 700K 之后, H₂-O₂ 链式反应才会启动; 光化学点火延迟时间随初始爆炸波后温度和压力的降低而增长。

关键词: 航空发动机; 光化学点火⁺; 混合燃料; 链式反应

中图分类号: V233.34

文献标识码: A

文章编号: 1001-4055 (2003) 04-0373-03

Photochemical ignition characteristic of H₂-O₂-Cl₂ mixtures

CAO Hui-dong, LI Feng, WANG Xiao-li, CHEN Wei

(School of Jet Propulsion, Beijing Univ. of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100083, China)

Abstract: In order to study the physics and chemistry process of photochemical ignition of H₂-O₂-Cl₂ mixtures, the analysis model is firstly presented. Then the temperature and the concentration of the particles in the photochemical ignition process under the different pressure behind shock waves and the temperature behind shock waves are calculated. Finally, the figures are plotted to analyze the photochemical ignition process, and the conclusions are deduced. The analysis result indicates that the photochemical ignition can adapt to the low pressure of high altitude. H₂-O₂ chain reaction will not start up until the temperature reaches 700K. When the temperature and pressure behind incident shock wave decrease, the photochemical ignition delay times will increase.

Key words: Aircraft engine; Photochemical ignition⁺; Mixed fuel; Chain reaction

1 引 言

光化学点火是目前世界上较尖端的一项科学研究,其目的是为了解决飞机在高空高速情况下的点火以及燃烧室的强化燃烧问题。国外已开展了一定的研究,文献[1]用可调紫外激光对 H₂-O₂ 预混气流进行照射,发现光化学点火与氧原子的振动和分解有关;文献[2]采用 H₂-O₂ 及 H₂-空气预混气流,认为氧分子吸收激光能量分离为氧原子,生成的氧原子又形成激光微等离子,以此代替火花点火;文献[3]采用 CH₄-空气或 CH₄-N₂O 混气,发现当激光束被聚焦并拥有 0.2mJ~40mJ 范围内的能量时,ArF、KrF 和 Nd:YAG 激光能够轻易点燃流经开槽燃烧室的大多数燃料与氧化剂的预混气。但上述文献对点火过程中混

气内部的物理化学过程阐述不详,尤其是缺乏对光化学点火延迟时间方面的研究。本文旨在阐明混气内部的化学反应过程,并对光化学点火延迟时间及温度、压力对其影响进行研究。

2 H₂-O₂-Cl₂ 混气光化学点火原理简述

由于 Cl₂ 可被近紫外激光激化,故在本文中采用 H₂-O₂-Cl₂ 混气。先取一定波长的紫外激光,使其波长与氯气分子的吸收波长相符,将该紫外激光经聚焦照射在混气流上,使得氯分子在吸收了激光能量后发生反应生成氯原子。然后氯原子与氢分子反应生成氯化氢分子和氢原子,氢原子与其他氯分子反应又可生成更多的氯化氢分子。随着氯化氢分子的生成,温度也逐渐升高,这促进了此链式反应的传播速度^[4]。

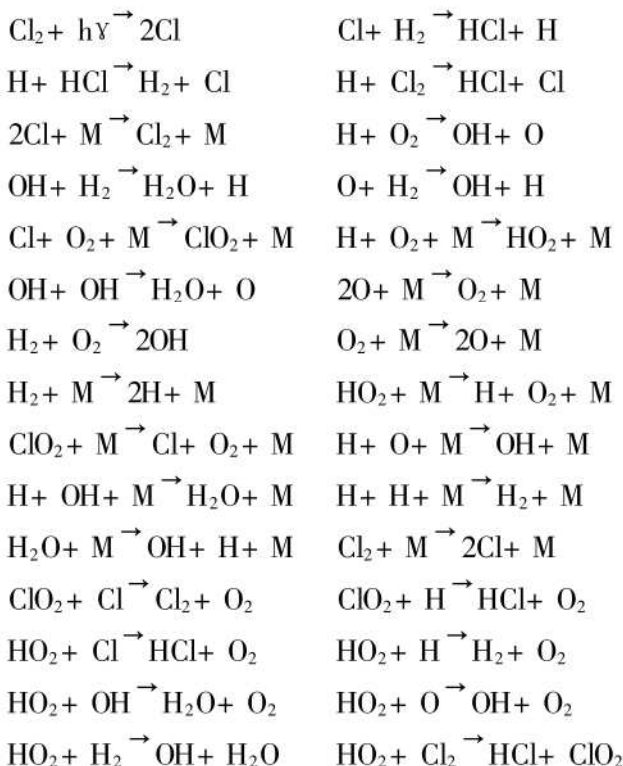
* 收稿日期: 2002-07-24; 修订日期: 2002-12-11。

作者简介: 曹会东 (1978—), 男, 硕士生, 研究领域为航空航天推进理论与工程。

在此过程中,氧分子也参与反应, H_2-O_2 链式反应启动。当温度达到一定值时,热爆炸就会发生,点火随之实现。

3 建立分析模型

本文的分析模型主要是以文献[4]为基础,并对其程序结构进行了一定的改进。依据此模型进行计算的物理过程是对混气进行光化学点火,该混气由 60% 的 H_2 , 20% 的 O_2 , 20% 的 Cl_2 组成。分析模型的主要目的为计算点火过程中各粒子浓度及温度变化。化学反应式如下:



其中“M”代表反应的某种中间产物,它可能是一种离子,也可能为分子、原子等,具体情况现在仍无法确定,其作用类似于催化剂。

根据温度、压力等初始条件求出每个化学反应式的速率 $RR(N)$ (N 为化学反应式序号), 就可以通过转换计算出每种粒子在时间间隔 Dt 内的变化量 $D(I)$ (I 为粒子序号), 则瞬时粒子浓度 $C(I)_{t+Dt} = C(I)_t + D(I)$ 。

温度的变化量主要通过计算化学反应中反应产物生成时释放的热量以及吸收光子热量得到。其中反应产物的生成热通过六项式的形式得到,该六项式的系数可由文献[5]查知;为了计算吸收光子所得的热量,首先需假定所有被吸收的光子所带有的能量都被系统吸收,然后计算出波长为 $3300 \text{ \AA}$ 的被吸收光子的平均能量值,则可得到系统吸收光子所得能量。

4 模型计算结果分析

图 1 和图 2 为爆炸波后压力 p_2 为 26664.4Pa, 波后温度 T_2 为 700K 时各种粒子浓度变化曲线,图 3 为不同爆炸波后压力和波后温度的光化学点火过程温度变化。从图 1 和图 2 中可以看出,在 $4\mu s$ 处多数曲线有明显变化,同时从图 3 中也可看到温度有迅速的提。最为明显而重要的是此时 Cl_2 浓度值降至极微小量,近似为零,同时 HCl 和 H 浓度达到最高点, Cl 浓度处最低点。这些现象对分析光化学点火的进程有着重要意义。 HCl 的生成主要作用有: 为 H_2 和 O_2 的反应建立另一条间接通道;产生热量引起温度升高;与升高的温度同时发生作用,推动 H_2-O_2 链式反应,引起点火。 $4\mu s$ 时 Cl_2 消耗殆尽,因此 HCl 浓度达到最高点,此后不断下降,造成温度增长趋势有所减缓。

在第 $24\mu s$ 时 O 原子的浓度达到最高点并在此后急速下降,这表明此时发生了光化学点火,光化学点火延迟时间为 $24\mu s$ 。从图 3 中也可以看出,温度在 $24\mu s$ 附近正为急剧上升趋势。此后, HCl 浓度不断下降,由于点火的消耗,氧原子浓度下降趋势更快。 Cl , H_2O 等粒子浓度稳步上升,而同时 H 浓度变化极小,基本平稳,这是由于 HCl 分解与 H , O 作用同时进行的结果。从图 3 中可以看到,此时温度正在稳步上升。

在第 $100\mu s$ 后,浓度和温度曲线大多保持持平,不再变化,如 H_2O , Cl , H , M , HCl , H_2 , OH 等,当然,严格来说,升与降都还存在,但其幅度微不足道。这说明 $100\mu s$ 后混气粒子浓度与温度基本平稳,此时点火引起的不稳定状态基本结束。

图 4 为爆炸波后压力 p_2 为 26664.4Pa, 波后温度 T_2 为 400K 时各种粒子浓度变化曲线。从中可以看到: O , OH 和 O_2 浓度在最初一段时间保持不变,而 Cl_2 的浓度变化趋势相对于图 2 也比较平缓,温度增长速度也相对缓慢的多,这些也直接导致了光化学点火延迟时间增长为 $55\mu s$ 。这主要是由于初始温度较低,造成 HCl 生成速度缓慢。随着反应进行,温度不断增高,终于在 $25\mu s$ 左右时温度达到 700K,氧分子开始参加反应, H_2-O_2 链式反应启动,反应骤然加剧。

图 5 为爆炸波后压力 p_2 为 13332.2Pa, 波后温度 T_2 为 700K 时各种粒子浓度变化曲线。从中可以看到,各种粒子浓度变化趋势与图 2 基本相同,但是变化

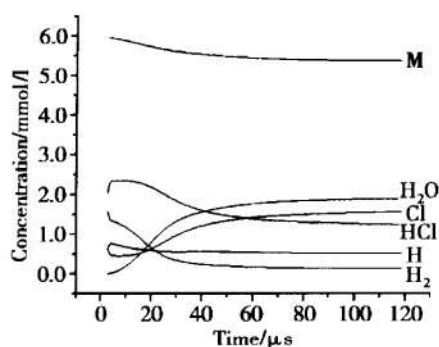


Fig. 1 Concentration of particles
under the condition of
 $p_2 = 26664.4 \text{ Pa}$, $T_2 = 700 \text{ K}$

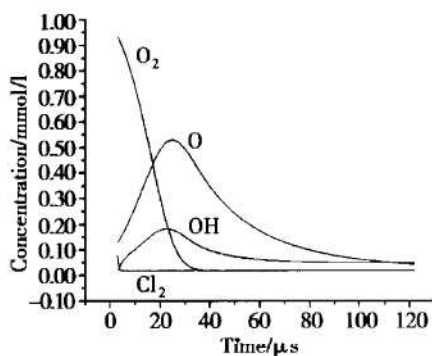


Fig. 2 Concentration of particles
under the condition of
 $p_2 = 26664.4 \text{ Pa}$, $T_2 = 700 \text{ K}$

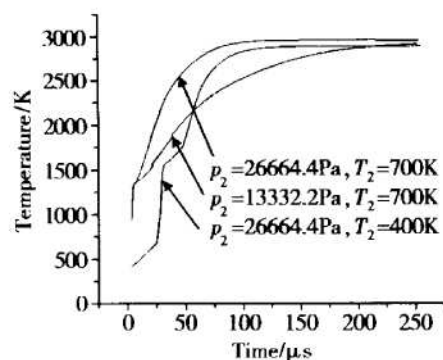


Fig. 3 Temperature under
different p_2 and T_2

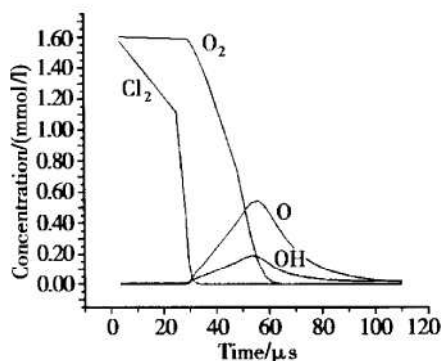


Fig. 4 Concentration of particles
under the condition of $p_2 = 26664.4 \text{ Pa}$, $T_2 = 400 \text{ K}$

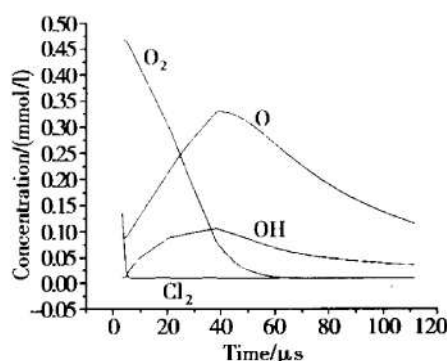


Fig. 5 Concentration of particles
under the condition of $p_2 = 13332.2 \text{ Pa}$, $T_2 = 700 \text{ K}$

相对缓慢, 光化学点火延迟时间也增长到了 $37 \mu\text{s}$ 。这主要是由于压力的降低使得量子产额大幅下降, 反应速度减慢。

5 结 论

(1) 在 H₂-O₂-Cl₂ 混气光化学点火中 HCl 有如下重要作用: 为 H₂ 和 O₂ 的反应建立另一条间接通道; 生成时产生大量热量引起温度升高; 与升高的温度同时发生作用, 推动 H₂-O₂ 链式反应, 引起点火。

(2) 在温度达到 700K 之后, H₂-O₂ 链式反应才会启动。

(3) 光化学点火延迟时间以氧原子的浓度最大时刻为基准, 它与波后温度、压力以及混气成分等都有密切关系, 温度和压力的下降都会造成光化学点火延迟时间的增长。

参考文献:

- [1] Forch B E, Miziolek A W. Ignition by efficient and resonant multiphot photochemical formation of microplasmas[R]. AD-A 184644, 1987.
- [2] Forch B E. Ultraviolet excimer laser-based ignition of H₂/Air and H₂/O₂ premixed flows[R]. AD-A 226389, 1990.
- [3] Miziolek A W, Sausa R C. Photochemical ignition study[R]. AD-A 153048, 1985.
- [4] Edse R, Rice E E, Kitzmiller C T. Supersonic combustion and burning in ramjet combustors[R]. AD-770061, 1973.
- [5] McBride B J, Neimel S, Ehlers J G, et al. Thermodynamic properties to 6000K for 210 substances involving the first 18 elements[R]. NASA SP-3001, 1963.

(编辑: 王居信)